



TITLE:

Sr₂RuO₄の超伝導メカニズム(修士論文(1999年度))

AUTHOR(S):

桑原, 武; 小杉, 正男

CITATION:

桑原, 武 ...[et al]. Sr₂RuO₄の超伝導メカニズム(修士論文(1999年度)).
物性研究 2000, 74(5): 509-541

ISSUE DATE:

2000-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96846>

RIGHT:

修士論文 (1999年度)

Sr₂RuO₄ の超伝導メカニズム

The Superconducting Mechanism of Sr₂RuO₄

東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻

86912 桑原 武

指導教官 小形正男

目 次

1	Introduction	510
2	³ He における磁気ゆらぎによる超流動メカニズム	514
2.1	研究小史	514
2.2	³ He 超流動の Cooper pair	515
3	Sr ₂ RuO ₄ の磁気ゆらぎ	520
3.1	<i>d</i> ベクトルについて	520
3.2	磁気ゆらぎに基づく超伝導メカニズムの問題	521
3.3	磁気ゆらぎの異方性	523
4	異方性がある場合の磁気ゆらぎによる超伝導	524
4.1	モデル—異方性の導入	524
4.2	磁気ゆらぎと Cooper pair の一般的な関係式	525
4.3	<i>T_c</i> の評価	529
5	Sr ₂ RuO ₄ への応用	530
5.1	Coupling Constant の評価	530
5.2	計算結果	533
5.3	結果の解釈	534
6	まとめ	536
A	ギャップ方程式の導出	536
A.1	singlet	537
A.2	triplet	539

1 Introduction

1986 年の発見以来、銅酸化物高温超伝導体の理論的解明は物性物理学の重要課題の一つとして、盛んに研究されている。その特徴のひとつとして銅と酸素からなる 2 次元平面 (CuO_2 面) と、そこにキャリアを供給するための層 (ブロック層) とが交互に積層した構造をとる事が挙げられる。層状ペロブスカイト構造と呼ばれるこの結晶構造は、超伝導にとって都合のよい環境を提供していると考えられるので、銅以外の元素を使っても類似の超伝導体を作ることができると言われてきた。高温超伝導体の研究と並行してこのような物質発見が試みられてきたが、1994 年初めて、前野らにより銅をルテニウム (Ru) に置き換えた Sr_2RuO_4 において超伝導相が発見された [1]。図 1 に示したように Sr_2RuO_4 の結晶構造は高温超伝導体 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ と全く同じである。

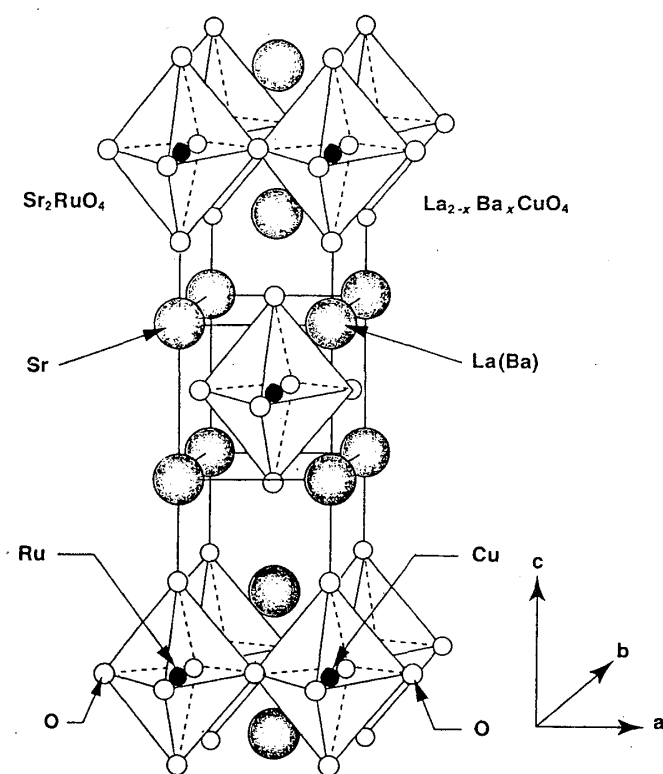


図 1: Sr_2RuO_4 と $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ の結晶構造

しかしこのように同じ構造をしているのであるが、両者の物性は大きく異なることが明らかになった。まず両者の電子状態についてまとめておこう。高温超伝導体において CuO_2 面にキャリアが注入されていないとき、Cu イオンは +2 価、O イオンは -2 価をとる。つまり Cu は 3d 軌道に 9 個の電子を含む。真空中では Cu は 5 重に縮退した 3d 軌道を持つが、固体中では結晶場により、その縮退が解ける (図 2 参照)。

この結果 $d_{x^2-y^2}$ 軌道が最もエネルギーが高い軌道になるので、 Cu^{2+} イオンは $d_{x^2-y^2}$ 軌道のみ half-filling となる。この結果強い電子相関のため、キャリアが注入されていないとき反強磁性絶縁体となる。

一方 Sr_2RuO_4 において Ru イオンは +4 価を取り、O イオンは -2 価をとる。すなわち

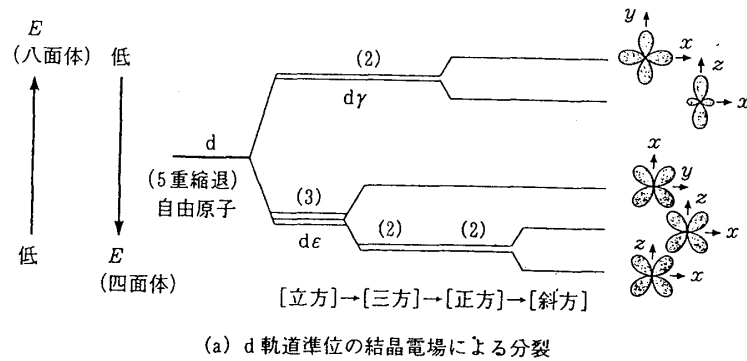


図 2: d 軌道準位の結晶電場による分裂

Ru は 4d 軌道において 4 個の電子を含む。結晶場によって Ru-4d 軌道の縮退は一部解け、Ru⁴⁺ イオンは縮退の残った $4d_{xy}$ 、 $4d_{yz}$ 、 $4d_{zx}$ 軌道に 4 個の電子を含んだ状態になる。実際バンド計算によると、Sr₂RuO₄ の Fermi 面と交わるバンドは、Ru- $4d_{xy}$ 、 $4d_{yz}$ 、 $4d_{zx}$ と O- $2p\pi$ の anti-bonding 軌道であることがわかっている [2][3]。電子相関は高温超伝導体ほど強くないので、Sr₂RuO₄ において、バンド理論によって計算された Fermi 面と、実験によって求められた Fermi 面はよく一致する。図 3、4 にそれぞれの手法で求められた Fermi 面を示す [4][5]。

高温超伝導体においては、Fermi 液体論による記述の正当性は、現在でも議論の対象になっているが、Sr₂RuO₄ に対しては、バンド理論に基づく Fermi 面が実際に観測されていることから示唆されるように、Fermi 液体論による記述が妥当と考えられている。その直接的な証拠のひとつに、低温領域において電気抵抗の T^2 則が成立することが挙げられる [1] (図 5 参照)。このように常伝導相における振る舞いは高温超伝導体と Sr₂RuO₄ で大きな違いが見られる。

両者の違いは超伝導相にも現れている。まず高温超伝導体はその名の通り高い転移温度を持つが、Sr₂RuO₄ の転移温度は 1.5K と低い [6]。また高温超伝導体は原子の置換によってさまざまな相が現れることが知られているが、Sr₂RuO₄ は不純物によって超伝導相は直ちに破壊され、常磁性体となる [6]。

更に、重要な相違として Cooper pair の違いが挙げられる。一般に Cooper pair は 2 電子がペアを組んだ状態なので、その合成スピンは $S=0$ と $S=1$ の 2 つの状態が考えられる。これに伴い Cooper pair は singlet pair と triplet pair に分けることができる。現在まで発見されているほとんどの超伝導体は singlet 超伝導であり、高温超伝導体もその例外ではない。一方 triplet 超伝導は ³He と重い電子系に属する UPt₃ でしか確認されていない。

Sr₂RuO₄ は類似の SrRuO₃ が強磁性体であることから、発見当初から triplet 超伝導ではないかと指摘されていた [7]。その後比熱 [8] や核磁気緩和 [9] の測定から異方的超伝導が示唆され、近年ナイトシフトによる測定により triplet 超伝導であることが証明された [10]。つまり triplet 超伝導であることが確認された 3 番目の例といえる。このように Sr₂RuO₄ は、高温超伝導体と同様の 2 次元系における超伝導体であるという興味のほかに、triplet 超伝導であるという興味も与えている。UPt₃ の電子状態は複雑なので、その微視的な理解がなかなか進んでいない。それに対し Sr₂RuO₄ の電子状態は比較的単純であり、また化学的に安定で高純度の大型単結晶も育成可能なので、この物質をもとに triplet 超伝導

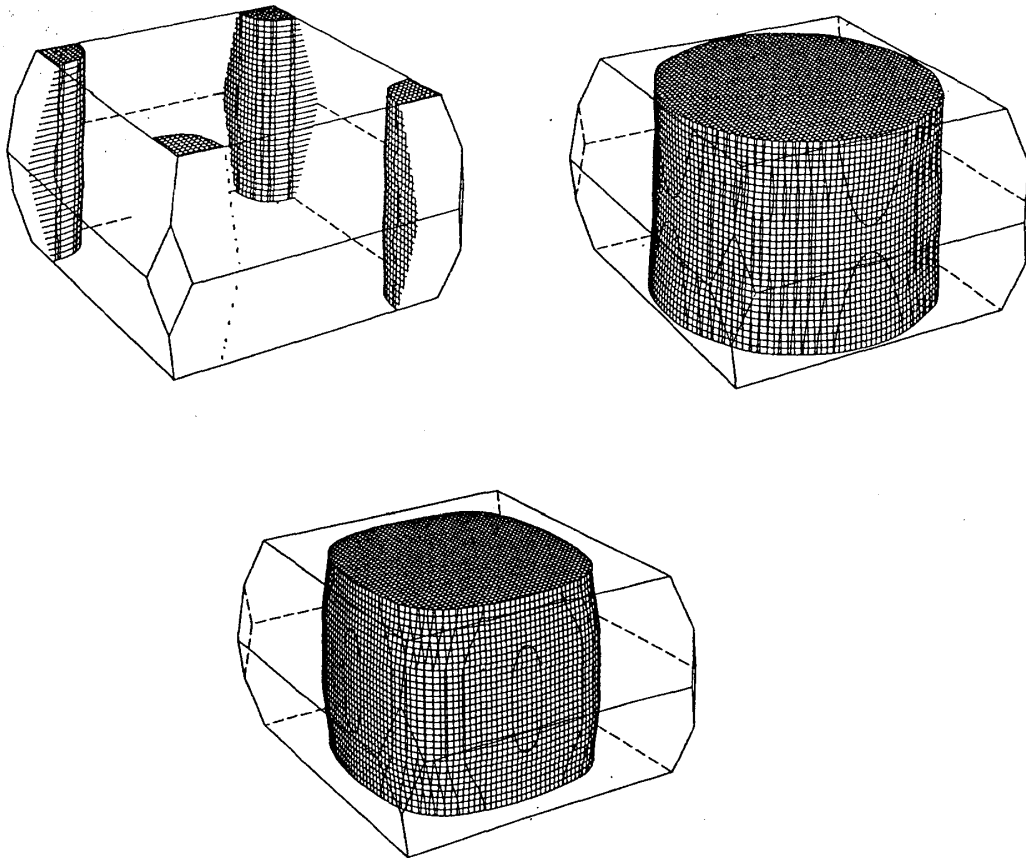


図 3: バンド計算によって求められた Fermi 面 [4]

の理解が飛躍的に進むものと期待されている。

このような期待を反映して、超伝導相発見当初から Sr_2RuO_4 は多くの関心を集め、実験・理論とも活発に研究が行われた。そしてその研究の勢いから、すぐにその微視的理解が進むと思われていたが、この期待は現在まで叶っていない。 Sr_2RuO_4 においても ^3He の場合と同じようなメカニズムが実現されていると仮定すると、強磁性的な磁気ゆらぎが強くなければならない。ところが Sr_2RuO_4 は 2 次元系であるために、 ^3He のような強磁性的ゆらぎが大きいとは限らない。更に最近の中性子散乱の実験により、強磁性的ゆらぎがほとんどないことが示された [22]。代わりに波数 $\mathbf{q}_0 = (\pm\frac{2\pi}{3}, \pm\frac{2\pi}{3})$ の反強磁性的なゆらぎが存在することが明らかになった。このピークは Fermi 面のネスティングとして理解できる。 Sr_2RuO_4 の微視的理解はこのような困難に直面している。

このような状況の中、本研究では実験結果から予想される反強磁性的な磁気ゆらぎを媒介とする超伝導メカニズムを再検討し、triplet 超伝導が可能か調べることにした。具体的には従来と同様 RPA の枠組みで考えたが、今まで暗黙のうちに仮定されてきた「スピン空間の回転対称性」を仮定しないでギャップ方程式を導出した。その結果磁気ゆらぎの異方性に今まで見過ごされていた役割があることがわかった。実際 Sr_2RuO_4 では NMR によって、磁気ゆらぎに異方性が報告されている。そこで磁気ゆらぎの異方性を現象論的に取り入れることによって、どの Cooper 対が実現されるか調べた。このような近似のもとで計算した結果、反強磁性的な磁気ゆらぎであっても異方性が強い場合には triplet が実

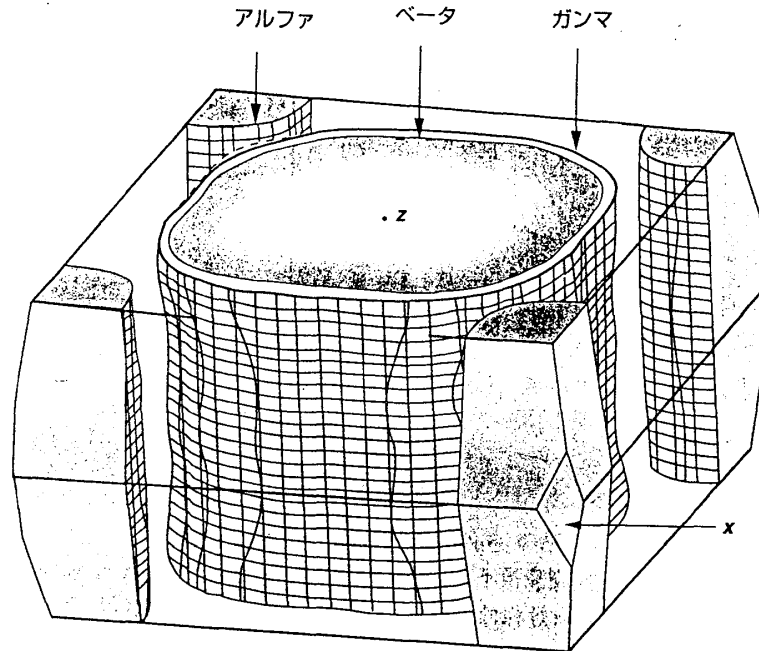
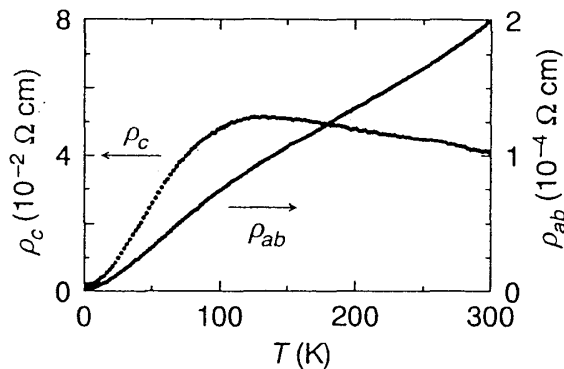


図 4: de-Haas van Alphen 効果によって求められた Fermi 面 [5]

図 5: 低温領域における Sr₂RuO₄ の電気抵抗 [1]

現するという結論を得た。

本文の構成は以下のである。まず第2章では³Heの超流動メカニズムについてまとめる。³He超流動は実験・理論とも広範に調べられているので、Sr₂RuO₄の超伝導メカニズムを理解する上でも重要な雛型を提供していると期待できる。そこで2.1で磁気ゆらぎと超伝導の関係がどのように調べてきたか簡単にまとめた後、2.2において磁気ゆらぎに基づく³Heの超流動メカニズムを紹介する[11]。磁気ゆらぎによって³Heのtriplet pairが説明できることを見る。

同じtriplet pairということから、Sr₂RuO₄の超伝導メカニズムも³He同様に磁気ゆらぎと考えるのが自然である。しかし最近の中性子散乱の実験からわかるように、Sr₂RuO₄では磁気ゆらぎの強磁性的成分がほとんどなく、2.2で述べる³Heと同じ方法を直接援用してもtriplet pairではなくsinglet pairが実現するという結論になってしまう。そこで我々は磁気ゆらぎによる超伝導のメカニズムという方法を拡張して、強磁性的でない磁気ゆらぎによってもtriplet超伝導体を実現する可能性を議論する(第4章)。第3章はその為の

準備を行う。まず 3.1 では d ベクトルに関する事柄をまとめた。現在 Sr_2RuO_4 の d ベクトルは $d(\mathbf{k}) = \hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ で表されると考えられている。この d ベクトルの裏づけとなる実験結果について簡単にまとめる。磁気ゆらぎに基づく超伝導メカニズムでは帯磁率の波数依存性が重要になる。そこで続く 3.2 では、中性子散乱の測定結果を紹介する。3.3 において磁気ゆらぎの異方性を報告している縦緩和率の実験結果を紹介する。我々は Sr_2RuO_4 の超伝導メカニズムには磁気ゆらぎの異方性が深くかかわっていると期待しているが、何故そのように期待するのか、その物理的な描象についても説明する。

3.3 で紹介した測定結果を受け、4.1 では磁気ゆらぎの異方性を現象論的に取り入れたモデルを導入する。このモデル化では ^3He で用いられてきた式はそのままの形では適用できない。そこで 4.2 において異方性がある場合にも成り立つ、磁気ゆらぎと Cooper pair の間に成立する一般的な関係式を導出する。ここで得られた関係式から磁気ゆらぎの異方性と d ベクトルの方向には深い関係があることが示される。4.2 で導いた gap 方程式に基づいて、4.3 では各 order の T_c の評価式を導出する。

5.1 では、バンド計算の結果として得られている帯磁率の形を使って、超伝導有効相互作用を評価する。5.2 で計算結果を示す。その結果磁気ゆらぎの異方性がない場合には singlet が実現するが、異方性が強くなると triplet であり、かつ d ベクトルが z 方向を向いた超伝導状態が実現することが示される。5.3 において 5.2 で得た結果の考察を行う。以上の議論を第 6 章でまとめる。

最後に付録として、本文で用いた gap 方程式の導出を行なう。

2 ^3He における磁気ゆらぎによる超流動メカニズム

^3He 超流動における triplet pair は、spin ゆらぎを媒介とした有効引力相互作用によって形成されていると考えられている。その紹介をする前に spin ゆらぎと超伝導の関係について、その研究の歴史を簡単に振り返っておく [12]。

2.1 研究小史

BCS 理論はフォノンを媒介とした電子間の有効引力相互作用によって超伝導を説明し、大きな成功を収めた。しかし強磁性寸前の金属 (Pd など) において、BCS 理論で予想される転移温度 (T_c) より低い T_c でしか超伝導が実現しないことが見出された。1960 年代 Berk と Schrieffer [13]、及び Doniach と Engelsberg [14] はこの原因として磁気ゆらぎ考えた。そこで図 6 のようなダイアグラムで表される Cooper pair 間の有効相互作用を計算し、実際に磁気ゆらぎによって T_c が抑制されることを確かめた。

1970 年代に入り、 ^3He において超流動相が発見された。 ^3He 超流動も 2 つの Fermion が Cooper pair を組むことによるが、 ^3He 液体中には BCS が仮定したフォノンは存在しないので、spin ゆらぎによるメカニズムが考えられた。 ^3He 超流動では triplet pair であることが知られていたが、強磁性的 spin ゆらぎを媒介としたメカニズムでは triplet pair が実現することが導かれるので、 ^3He の超流動はスピンゆらぎによるものであると考えられている。triplet が安定化される原因は、3 次元系においては静帯磁率が $q = 0$ のところで最大となり、これが更に Stoner factor で増強されたからである。

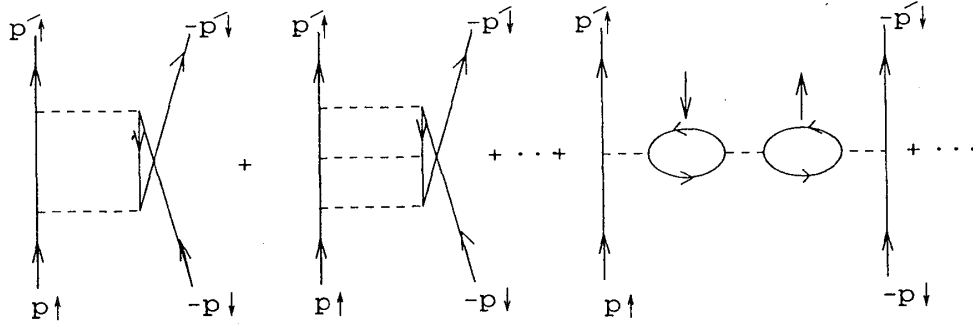


図 6: spin ゆらぎを媒介とする singlet pair 間の有効相互作用 (RPA)

その後重い電子系において超伝導相が発見されると、磁気ゆらぎによる超伝導メカニズムが研究された。そして現在、spin ゆらぎによる超伝導メカニズムは高温超伝導体へも適用され、弱結合アプローチとして活発に研究されている。

2.2 ³He 超流動の Cooper pair

ここでは spin ゆらぎを有効相互作用としたとき、singlet pair ではなく triplet pair が実現することを導く。そして Sr₂RuO₄ の超伝導メカニズムを考える上での足掛かりとする。

³He 原子間にはハードコア的な斥力相互作用が存在するので、それを δ 関数で近似すると Hamiltonian は

$$H = \sum_{ks} \psi_s^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \Delta - \mu \right) \psi_s(\mathbf{r}) + \frac{I}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_s^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{-s}^\dagger(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{-s}(\mathbf{r}') \psi_s(\mathbf{r}), \quad (1)$$

と書ける。ただし $\psi_s(\mathbf{r})$ は spin s 、場所 \mathbf{r} における Fermion(³He) の field operator、 μ は化学ポテンシャルである。 Ω を系の体積とすると、field operator は $\psi_s(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{\Omega}) \sum_{\mathbf{k}} a_{ks} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ と平面波で展開できる。これを上式に代入すれば

$$H = \sum_{ks} \bar{\epsilon}(\mathbf{k}) a_{ks}^\dagger a_{ks} + \frac{I}{2\Omega} \sum_{kk'qs} a_{ks}^\dagger a_{k'-s}^\dagger a_{k'-q-s} a_{k+qs}, \quad \bar{\epsilon}(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} - \mu, \quad (2)$$

を得る。

Berk と Schrieffer、Doniach と Engelsberg は singlet pair 間の有効相互作用のみ考えたが、triplet pair 間の有効相互作用も扱うため、図 6 に加え

で表される有効相互作用を考える。ただし有効相互作用の ω 依存性 (i.e. 遅延効果) は無視する。各ダイアグラムをそれぞれ書き下すと

ring(equal spin)

$$\begin{aligned} & \sum_{kk's} (-1) \left(\frac{I}{\Omega} \right)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left[1 + \left(\frac{I}{\Omega} \right)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \dots \right] a_{ks}^\dagger a_{-ks}^\dagger a_{-k's} a_{k's} \\ &= - \sum_{kk's} \frac{I}{\Omega} \frac{(I/\Omega) \chi_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{1 - (I/\Omega)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} a_{ks}^\dagger a_{-ks}^\dagger a_{-k's} a_{k's} \\ &\equiv - \sum_{kk's} V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{ks}^\dagger a_{-ks}^\dagger a_{-k's} a_{k's}, \end{aligned} \quad (3)$$

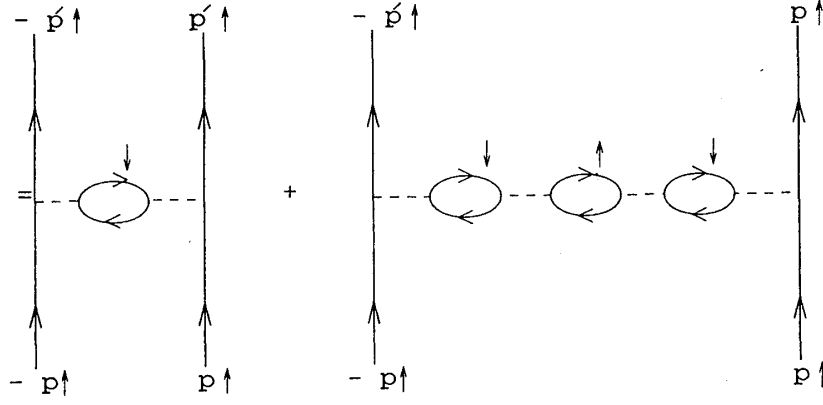


図 7: spin ゆらぎを媒介とする triplet pair 間の有効相互作用 (RPA)

ring(anti-equal spin)

$$\begin{aligned}
 & \sum_{kk's} \left(\frac{I}{\Omega} \right)^3 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left[1 + \left(\frac{I}{\Omega} \right)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \dots \right] a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's} \\
 = & \sum_{kk's} \frac{I}{\Omega} \frac{(I/\Omega)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{1 - (I/\Omega)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's} \\
 \equiv & \sum_{kk's} V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's},
 \end{aligned} \tag{4}$$

ladder

$$\begin{aligned}
 & \sum_{kk's} \left(\frac{I}{\Omega} \right)^2 \chi_0^2(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \left[1 + \left(\frac{I}{\Omega} \right) \chi_0(\mathbf{k} + \mathbf{k}') + \dots \right] a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's} \\
 = & - \sum_{kk's} \frac{I}{\Omega} \frac{(I/\Omega) \chi_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{1 - (I/\Omega) \chi_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's} \\
 \equiv & - \sum_{kk's} V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's},
 \end{aligned} \tag{5}$$

 となる。 $\chi_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は $I = 0$ における帯磁率を表す。ただし慣習に従い

$$\left[\frac{(g\mu_B)^2}{2} \right]^{-1} \chi_0(\mathbf{q}) \longrightarrow \chi_0(\mathbf{q}), \tag{6}$$

 としている。また ladder の導出において和の添え字を \mathbf{k}' から $-\mathbf{k}'$ に置き換えた。

3次元放物線バンドを考えているので、 $\chi_0(\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 付近にピークを持つ。ここで大きな Stoner factor $\frac{1}{1 - (I/\Omega)\chi_0(\mathbf{q})} \gg 1$ を仮定する。すると $V_{\text{re}}(\mathbf{q})$ 、 $V_{\text{rae}}(\mathbf{q})$ 、 $V_{\text{lad}}(\mathbf{q})$ は

$$V_{\text{re}}(\mathbf{q}) = \frac{I}{2\Omega} \left(\frac{1}{1 - Ku(\mathbf{q})} - \frac{1}{1 + Ku(\mathbf{q})} \right) \simeq \frac{I}{2\Omega} \frac{1}{1 - Ku(\mathbf{q})}, \tag{7}$$

$$V_{\text{rae}}(\mathbf{q}) = \frac{I}{2\Omega} \left(\frac{1}{1 - Ku(\mathbf{q})} + \frac{1}{1 + Ku(\mathbf{q})} - 2 \right) \simeq \frac{I}{2\Omega} \frac{1}{1 - Ku(\mathbf{q})}, \tag{8}$$

$$V_{\text{lad}}(\mathbf{q}) = \frac{I}{\Omega} \left(\frac{1}{1 - Ku(\mathbf{q})} - 1 \right) \simeq \frac{I}{\Omega} \frac{1}{1 - Ku(\mathbf{q})}, \tag{9}$$

と近似できる。ただし $(I/\Omega)\chi_0(\mathbf{q}) \equiv Ku(\mathbf{q})$ と置いた (ここで $u(\mathbf{q})$ は $u(0) = 1$ となるように規格化した)。3次元系では $u(\mathbf{q})$ は $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ のところが最大となり、このため Stoner

factor は $q = 0$ (強磁性成分) のところが最大である。これが triplet を安定化させる原因である。

以上の近似のもとでは、磁気ゆらぎを媒介とした Cooper pair 間の有効相互作用はまとめて

$$\begin{aligned}
 & - \frac{I}{4\Omega} \sum_{kk'} \sum_{ss'\tilde{s}\tilde{s}'} \frac{1}{1 - Ku(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger a_{-k'\tilde{s}'} a_{k'\tilde{s}} (\boldsymbol{\sigma}_{ss'} \boldsymbol{\sigma}_{\tilde{s}\tilde{s}'}) \\
 \equiv & - \frac{1}{4} \sum_{kk'} \sum_{ss'\tilde{s}\tilde{s}'} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger a_{-k'\tilde{s}'} a_{k'\tilde{s}} (\boldsymbol{\sigma}_{ss'} \boldsymbol{\sigma}_{\tilde{s}\tilde{s}'}),
 \end{aligned} \tag{10}$$

と表される¹。上式で Pauli の spin 行列に関して内積で表されることからわかるように、RPA に基づく有効相互作用は spin 空間における回転対称性を持つ。

Cooper pair 間にこの磁気ゆらぎを媒介とした相互作用のみが働くと考ええると、singlet/triplet の gap 方程式はそれぞれ

singlet

$$\Delta(\mathbf{k}) = -3 \sum_{k'} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{sin}}(\mathbf{k}')), \tag{11}$$

triplet

$$d^a(\mathbf{k}) = \sum_{k'} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') d^a(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{tri}}(\mathbf{k}')), \tag{12}$$

となる (4.2 参照)。ただし

$$\Theta(E) \equiv \frac{1}{2E} \tanh \left(\frac{\beta E}{2} \right), \tag{13}$$

$$E_{\text{sin}}(\mathbf{k}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta(\mathbf{k}) \Delta^*(\mathbf{k})}, \tag{14}$$

$$E_{\text{tri}}(\mathbf{k}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})^2 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{d}^*(\mathbf{k})}, \tag{15}$$

である。 $\mathbf{d} = (d^1, d^2, d^3)$ は triplet pair の order parameter であり、 \mathbf{d} ベクトルと呼ばれる。ここで添え字 1, 2, 3 はそれぞれ x, y, z を表すものとする。また gap $\Delta(\mathbf{k})$ 、 $d^a(\mathbf{k})$ の定義は (110)(111) 参照。))

この gap 方程式からどの Cooper pair が favor されるか評価していこう。さて、(11)(12) の singlet/triplet をまとめて

$$\phi(\mathbf{k}) = a_\phi \sum_{k'} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi(\mathbf{k}') \Theta(E(\mathbf{k}')), \tag{16}$$

と表すことにする。ただし

$$a_{\text{singlet}} = -3, \tag{17}$$

$$a_{\text{triplet}} = 1, \tag{18}$$

である (ここで singlet と triplet では符号が異なることに注意)。

¹Nakajima[11] では演算子の spin 添え字を $\frac{1}{4} \sum_{kk'} \sum_{ss'\tilde{s}\tilde{s}'} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger a_{-k'\tilde{s}'} a_{k'\tilde{s}} (\boldsymbol{\sigma}_{ss'} \boldsymbol{\sigma}_{\tilde{s}\tilde{s}'})$ と表しているが、両者は同値である。

系の球対称性を反映して $J(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ にのみ依存する。そこで $\cos \gamma \equiv \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$ と置くと ($\hat{\mathbf{k}}$ は \mathbf{k} の方向を表す単位ベクトル)

$$J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = J(k, k', \cos \gamma), \quad (19)$$

と表すことができる ($k \equiv |\mathbf{k}|$)。 $\cos \gamma$ に関して Legendre 多項式で展開し、更に球面調和関数の加法定理を用いると

$$\begin{aligned} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \sum_l J_l'(k, k') P_l(\cos(\gamma)) \\ &= \sum_{l,m} J_l(k, k') Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}'), \end{aligned} \quad (20)$$

と書ける。一方 gap 関数も球面調和関数で展開しておく。

$$\phi(\mathbf{k}) = \sum_{l,m} \phi_{lm}(k) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}). \quad (21)$$

これらを gap 方程式に代入すると (球面調和関数の直交性を用いることにより)

$$\phi_{lm}(k) = \frac{\Omega}{2\pi^2} \int dk' k'^2 a_\phi J_l(k, k') \Theta(E_\phi(k')) \phi_{lm}(k'), \quad (22)$$

が導かれる。

Cooper pair は Fermi 面近傍のみに存在すると仮定すると、order parameter は

$$\phi_{lm}(k) = \phi_{lm,0} \theta(k_c - |k_F - k|), \quad (23)$$

と書ける (k_c は cut-off 波数であり、 $k_c \ll k_F$ を満たすものとする。また $\phi_{lm,0}$ の k 依存性は無視した)。これを上式に代入すると

$$1 \simeq \frac{\Omega k_F^2}{2\pi^2} a_\phi J_l(k_F, k_F) \int_{\text{cut-off}} dk' \frac{1}{2E(\mathbf{k}')} \tanh \frac{\beta_c E(\mathbf{k}')}{2}, \quad (24)$$

と近似できる。(23) 式の仮定と (22) をあわせて考えると、 $J_l(k, k')$ のうち Cooper pair に効くのは $k, k' \simeq k_F$ の部分だけであるので $J_l(k, k')$ は一定とみなし積分の前に出した。一方 $\frac{1}{2E} \tanh \frac{\beta_c E}{2}$ はカットオフに強く依存するので、積分の前に出すことはできない。また積分の添え字 cut-off は

$$\int_{\text{cut-off}} dk \equiv \int_{k_F - k_c}^{k_F + k_c}, \quad (25)$$

を意味する。

この式を用いて T_c を評価していこう。 T_c 近傍において、ギャップは微小量となるから $E \simeq \bar{\epsilon}$ である。更に積分は Fermi 面の近傍について行うので

$$\begin{aligned} \epsilon(\bar{\mathbf{k}}) &\simeq \left. \frac{d\bar{\epsilon}}{dk} \right|_{k=k_F} (k - k_F) \\ &= \hbar v_F (k - k_F), \end{aligned} \quad (26)$$

と近似できる。よって (24) は 1 スピンあたりの状態密度 $N(0) = \Omega m k_F / 2\hbar^2 \pi^2$ を用いて

$$1 = a_\phi J_l(k_F, k_F) N(0) \int_0^{\beta_c \epsilon_F \frac{k_c}{k_F}} \frac{1}{x} \tanh x dx, \quad (27)$$

と表すことができる。 $\beta_c \varepsilon_F \frac{k_c}{k_F} \gg 1$ を仮定して解くと結局

$$k_B T_c = 2.26 \varepsilon_F \frac{k_c}{k_F} \exp \left[-\frac{1}{N(0) a_\phi J_l(k_F, k_F)} \right], \quad (28)$$

と評価できる。

よって最も高い転移温度を与える Cooper pair は最も大きい $a_\phi J_l(k_F, k_F)$ を与える Cooper pair であると言える。また (22) に遡ると $a_\phi J_l(k_F, k_F) < 0$ であると両辺の符号が異なり矛盾が生じる。つまりそのような Cooper pair は実現し得ない。

$a_\phi J_l(k_F, k_F)$ の評価

最も高い転移温度を与える Cooper pair が実際に実現する Cooper pair であると考え、³He 超流動で実現する Cooper pair を評価する。まず $J_l(k_F, k_F)$ から考える。定義より

$$J_l(k, k') = 2\pi \int_{-1}^1 J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') P_l(\cos \gamma) d(\cos \gamma). \quad (29)$$

$$J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{I/\Omega}{1 - Ku(\mathbf{q})}, \quad (30)$$

において $u(\mathbf{q})$ は $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ にピークを持つので、 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ のまわりで展開する²。

$$u(\mathbf{q}) \simeq 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\mathbf{q}}{2k_F} \right)^2. \quad (31)$$

(k_F は Fermi 波数) 従って

$$\begin{aligned} J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \frac{I/\Omega}{1 - K + \frac{K}{3} \frac{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \gamma}{(2k_F)^2}} \\ &\rightarrow \frac{I/\Omega}{1 - K + \frac{K(1 - \cos \gamma)}{6}} \text{ at } k, k' = k_F, \\ &\simeq \frac{6I/\Omega}{1 - \cos \gamma}, \end{aligned} \quad (32)$$

と近似できるので (ただし大きな Stoner factor を仮定して $K \simeq 1$ と近似した)

$$\begin{aligned} J_l(k_F, k_F) &= 12\pi I/\Omega \int_{-1}^1 \frac{1}{1 - \cos \gamma} P_l(\cos \gamma) d(\cos \gamma) \\ &= 12\pi I/\Omega \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-1}^1 x^n P_l(x) dx, \end{aligned} \quad (33)$$

と評価できる。Legendre 多項式の公式³より J_l は l が小さいものほど大きな値をとることがわかる。

²3次元放物線バンドに対しては $u(\mathbf{q}) = (1/2) + (1 - x^2)/(4x) \log |(x+1)/(x-1)|$ 、ただし $x = |\mathbf{q}|/2k_F$

³ $n < l$ もしくは $n - l$: 奇数の時 $\int_{-1}^1 x^n P_l(x) dx = 0$ 、 $n - l$: 偶数のとき $\int_{-1}^1 x^n P_l(x) dx = [2^{l+1} n! \{(n+l)/2\}! / \{(n-l)/2\}! \{(n+l+1)\}!]$ 。

一方 spin の入れ換えに関して singlet は反対称、triplet は対称であることを反映して gap 関数 $\Delta(\mathbf{k}), d(\mathbf{k})$ は

$$\Delta(-\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k}), \quad (34)$$

$$d(-\mathbf{k}) = -d(\mathbf{k}), \quad (35)$$

を満足する。これは球面調和関数で展開している今の場合、 ϕ_{lm} において l ;even は singlet、 l :odd は triplet に対応することを意味する。つまり (17)(18) より $l = 0$ ならば $a_\phi = -3$ 、 $l = 1$ ならば $a_\phi = 1$ 、 $l = 2$ なら $a_\phi = -3$ と各部分波の符号が決まる。これからスピンゆらぎの有効相互作用しかない場合、最も大きい $J_{l=0}$ は $a_\phi J_l < 0$ より許されない状態になる。つまり最も大きい $a_\phi J_l(k, k')$ は $l = 1$ の Cooper pair である。

以上の議論から ^3He 超流動において triplet かつ $l = 1$ の部分波を持つ Cooper pair が最も高い転移温度を与えることがわかるが、これは実験事実と一致する⁴。このことから逆に ^3He 超流動のメカニズムは spin ゆらぎを媒介とした有効相互作用であると考えられる。

3 Sr_2RuO_4 の磁気ゆらぎ

2.2 の議論を踏まえて Sr_2RuO_4 の超伝導メカニズムを考えていく。triplet 超伝導の order parameter d ベクトルは、波数依存性のほかに方向依存性を持つ。超伝導メカニズムを考える上で当然その方向についても考えなければならないので、まず Sr_2RuO_4 の d ベクトルについて簡単にまとめる。

3.1 d ベクトルについて

triplet 超伝導の場合、超伝導の秩序変数として d ベクトルを用いると便利なので、ここでまとめておく。はじめに

$$t_k^a = \sum_{ss'} (-i)(\sigma^2 \sigma^a)_{ss'} a_{-ks} a_{ks'}, \text{ for } a = 1, 2, 3. \quad (36)$$

なる演算子を定義する。具体的には

$$\begin{aligned} t_k^1 &= -a_{-k\uparrow} a_{k\uparrow} + a_{-k\downarrow} a_{k\downarrow} \\ t_k^2 &= -i(a_{-k\uparrow} a_{k\downarrow} + a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow}) \\ t_k^3 &= a_{-k\uparrow} a_{k\downarrow} + a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \end{aligned} \quad (37)$$

である⁵。 d ベクトルは、この t -operator の期待値に、それぞれの Cooper pair のチャンネルに対応する相互作用 $V_{tri,a}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ を掛けた

$$d^a(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{tri,a}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle t_{\mathbf{k}'}^a \rangle, \quad (38)$$

⁴ ^3He 超流動における triplet pair は特に P 波対と呼ばれる

⁵ 以下 t -operator と呼ぶことにする

として定義される。

一般に転移温度近傍における超伝導の order parameter は、結晶場の対称性によって分類できることが知られている [15]。この手法は Sr₂RuO₄ にも応用され、Rice らによって可能な d ベクトルが表のようにまとめられた。

表 1. 群論による d ベクトルの分類

Γ	$d(\mathbf{k})$
A_{1u}	$\hat{x} \sin k_x + \hat{y} \sin k_y$
A_{2u}	$\hat{x} \sin k_y - \hat{y} \sin k_x$
B_{1u}	$\hat{x} \sin k_x - \hat{y} \sin k_y$
B_{2u}	$\hat{x} \sin k_y - \hat{y} \sin k_x$
E_u	$\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$

その後実験によって

- c 軸方向の帯磁率は超伝導相、常伝導相とも同じ値をとる [10]
- Cooper pair が時間反転対称性を破っている [16]

ことが報告された。この実験結果と整合する order parameter は $d(\mathbf{k}) = \hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ ⁶ だけなので、現在 Sr₂RuO₄ の d ベクトルの最有力候補となっている。また最近 Josephson 結合においてもこの order parameter を支持する結果が得られている [17]。

$d \parallel \hat{z}$ ということは $d^3(\mathbf{k})$ のみが値を持つということであり、Cooper pair としては、(37) 式最後の $S = 1$ 、 $S^z = 0$ の対であることを意味している。また超伝導のギャップは (15) から

$$|d(\mathbf{k})| = \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y} \quad (39)$$

であるから、一般には Fermi 面上でのノードは存在しない。最近 Sr₂RuO₄ の超伝導エネルギーギャップについて新しい見解が示されたので触れておく。初期の実験において、比熱の残留状態密度 [8] や核磁気緩和の $1/T_1 T = \text{const.}$ [9] が観測された。これはギャップレスを意味し、ほぼ等方的なエネルギーギャップを意味する $d(\mathbf{k}) = \hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ とは矛盾する。この問題を回避するため、軌道依存型超伝導 (ODS) という概念が提案され [18]、関心を集めた。しかし最近純度の高い Sr₂RuO₄ で追試が行われた結果、比熱 [19]・核磁気緩和 [20]⁷とも line node を意味する結果が報告されている。 $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ はほぼ isotropic gap だが、わずかな不純物により gap が埋まり、line node 的な振る舞いをする可能性が理論的に指摘されている [20] ので、本論文では比熱や核磁気緩和の実験も $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ で説明可能である、と考えて議論を進めていく。

3.2 磁気ゆらぎに基づく超伝導メカニズムの問題

triplet 超伝導体はその稀少性から考えて、BCS のフォノンを媒介としたメカニズムとは別の超伝導メカニズムによって Cooper pair を組んでいると考えられる。triplet 超伝導

⁶ 正確には右辺にギャップの大きさ Δ を掛ける必要がある

⁷ これは理論の論文だが、reference でこの実験結果について触れている。実験によって得られたグラフは 1999 年秋の物理学会予稿集 25pYR-9 参照

は ^3He でも実現していることから、磁気ゆらぎにその原因を求めるのは自然といえる。本研究でも Sr_2RuO_4 の超伝導メカニズムは磁気ゆらぎに基づいていると仮定する。

しかし、同じ triplet 超伝導ではあるが、磁気ゆらぎの波数依存性という点で ^3He と大きく異なる。2.2で紹介したように ^3He は3次元放物線バンドなので、 $q=0$ にピーク(強磁性的ゆらぎ)が存在した。しかし Sr_2RuO_4 は2次元系なので、放物線バンドを仮定すると $\chi_0(q)$ は $|q|=0\sim 2k_F$ の範囲で一定値となる。このため強磁性的ゆらぎは3次元の ^3He ほど強くはない。このことに加え、 Sr_2RuO_4 のFermi面(図3、4参照)の形を見ると、ネスティングの効果が期待できる。実際MazinとSinghはバンド計算に基づいて帯磁率 $\chi_0(q)$ を計算した。その結果 $q=(\pm 2\pi/3, \pm 2\pi/3)$ 付近に、ネスティングに伴う大きなピーク(反強磁性的ゆらぎ)を持つという結果を得た[21]。彼らによって求められた $\chi_0(q)$ を図8に示す。

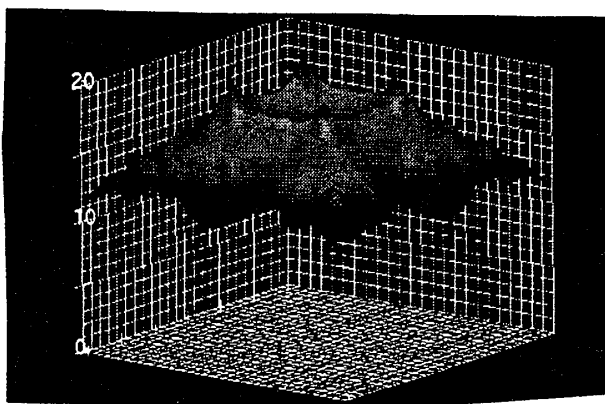


図 8: バンド計算による $\chi_0(q)$ [21]

また最近になって、帯磁率のこのような振る舞いは中性子非弾性散乱によって確かめられた[22]。その結果を図9に示す。

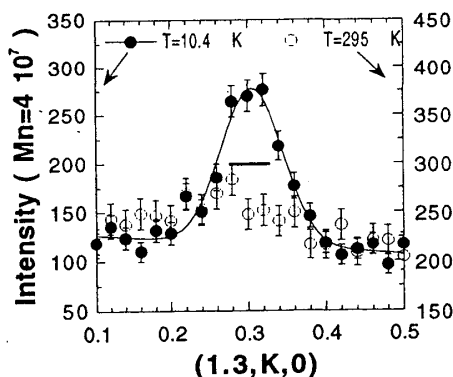


図 9: 中性子散乱による $(1.3, k)$ 方向の $\chi_0(q)$ [22]

一方NMRの実験では強磁性的ゆらぎが見えると報告されており[24][25]、この強磁性的ゆらぎを用いて He^3 のABM相同様、強結合の効果を取り入れると $d(\mathbf{k}) = \hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ が説明できるとする研究もある[26]。

しかし中性子散乱は磁気ゆらぎの波数依存性を直接観測するのに対して、NMRで磁気ゆらぎの波数依存性を調べるには、いくつかの考察を経なければならない。またFermi面

のネスティングから反強磁性的ゆらぎの存在は否定し得ないので、NMR の結果だけを根拠に Sr₂RuO₄ の超伝導メカニズムは強磁性的ゆらぎによる、とする立場には疑問が残る。

以上の考察から我々は磁気ゆらぎを媒介としているならば、ネスティングベクトル $q_0 \equiv (\pm 2\pi/3, \pm 2\pi/3)$ の反強磁性的ゆらぎを仮定しなければならないと考えた。しかしこの仮定を置くと一般的に singlet、特に d 波が実現すると考えられるので、Sr₂RuO₄ の場合には何らかの別のメカニズムが必要である。

3.3 磁気ゆらぎの異方性

今までの研究をまとめると次のようになる：バンド計算や中性子散乱によって Sr₂RuO₄ の磁気ゆらぎは反強磁性的ゆらぎが強く、超伝導メカニズムに効いている可能性が示唆される。しかし反強磁性的ゆらぎを仮定すると triplet である理由が説明できない。

そこで我々は反強磁性的ゆらぎが超伝導にかかわっていることはほぼ間違いないが、それ以外の要素も超伝導メカニズムに深くかかわっていると考え、NMR や中性子散乱の実験結果を見直した。そして Sr₂RuO₄ の磁気ゆらぎには異方性があるという報告に着目した。この異方性は O-NMR による縦磁気緩和によって測定されている [25]。それを図 10 に示す。

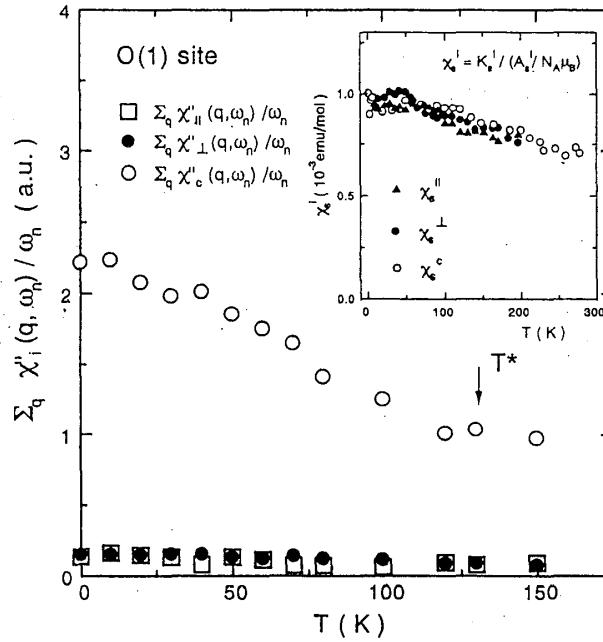


図 10: 縦緩和率による $\Sigma q \text{Im}\chi_i(q, \omega_n)/\omega_n$

等方的な系では $\Sigma q \text{Im}\chi_i(q, \omega_n)/\omega_n$ (i はそれぞれの結晶軸を表す) に異方性は存在しないが、Sr₂RuO₄ において c 軸方向の $\Sigma q \text{Im}\chi_c(q, \omega_n)/\omega_n$ は ab 面内のそれに比べて、大きく enhance していることがわかる。これは Ru の d 電子が d_{xy} 、 d_{yz} 、 d_{zx} の 3 つの軌道からなっており、Fermi エネルギーを横切るバンドが複数個あるためだと考えられる。超伝導に寄与する主なバンドは、そのうちの 2 次元的なバンドで、このバンドに関わる電子の磁気的な性質に異方性が現れると考えられる。

しかし今まで超伝導メカニズムにおいて、磁気ゆらぎの異方性は理論的に扱われてこなかった。それは第一に異方性に伴う重要な効果が知られていなかったことによるが、実際問題として triplet 超伝導は singlet に比べて自由度が多く扱いにくい。そのために磁気ゆらぎに異方性を取り入れようとする、非常に議論が難しくなると思われていた⁸。

しかし物理的に考えてみると、特に triplet 超伝導の場合、磁気ゆらぎの異方性は何らかの役割を担っていると考えられる。triplet 超伝導の order parameter \mathbf{d} ベクトルは Cooper pair のスピンと垂直方向を向く、という物理的な意味が知られている [28](今の場合 $\mathbf{d} \parallel \hat{z}$ なので、 $S^z = 0$ という xy 面内に spin がそろった Cooper pair が実現している)。よって磁気ゆらぎを媒介として Cooper pair を組む場合、磁気ゆらぎに異方性があるならば Cooper pair の spin の向きにも異方性が現れ、その結果 \mathbf{d} ベクトルが特定の方向を向きやすくなる、と考えるのは自然なことではないだろうか？ Sr_2RuO_4 では実際に異方性が測定されているので、 \mathbf{d} ベクトルの方向もその異方性によると期待できる。

以上のことから我々は Sr_2RuO_4 の超伝導メカニズムは q_0 の反強磁性的ゆらぎに基づくのであるが、さらに磁気ゆらぎの異方性が重要な働きをしているものと考えた。しかしそれを理論的に扱うには今までのやり方を拡張する必要がある。次章で紹介する RPA 理論の拡張が本研究の主要な部分である。

4 異方性がある場合の磁気ゆらぎによる超伝導

4.1 モデル—異方性の導入

前章で述べた通り、我々の課題は磁気ゆらぎに基づく超伝導メカニズムを、磁気ゆらぎに異方性がある場合に拡張することである。厳密には Hamiltonian に異方性をもたらす項を導入すべきだが、本研究の目的は異方性が Cooper pair にどのような影響を及ぼすかを調べることであって、異方性の origin を調べることではない。よって異方性の起源に関しては考えないことにする。そこで以下のように異方性を現象論的に取り入れた議論をする。

まず Hubbard Hamiltonian

$$H_{\text{Hub.}} = H_0 + \frac{I}{2N} \sum_{kk'qs} a_{ks}^\dagger a_{k'-s}^\dagger a_{k'-q-s} a_{k+qs}, \quad (40)$$

から磁気ゆらぎを媒介とする Cooper pair 間の有効相互作用を求める。ただし N は系の unit cell の数を表す。また H_0 は一体の Hamiltonian の部分であり、帯磁率の異方性はここから生じると仮定する。 $H_{\text{Hub.}}$ と 2.2 の H の類似性より RPA の範囲内での有効相互作用は直ちに書き下すことができ

$$-\sum_{kk's} V_{\text{re}}(k-k') a_{ks}^\dagger a_{-ks}^\dagger a_{-k's} a_{k's}, \text{ (ring equal spin)} \quad (41)$$

$$\sum_{kk's} V_{\text{rae}}(k-k') a_{ks}^\dagger a_{-k-s}^\dagger a_{-k'-s} a_{k's}, \text{ (ring anti-equal spin)} \quad (42)$$

⁸筆者の推測

$$-\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'s} V_{\text{lad}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}-s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}'-s}, (\text{ladder}) \quad (43)$$

となる。ただし

$$V_{\text{re}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{I}{N} \frac{(I/N) \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{1 - (I/N)^2 \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}^2(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}, \quad (44)$$

$$V_{\text{rac}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{I}{N} \frac{(I/N)^2 \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}^2(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{1 - (I/N)^2 \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}^2(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}, \quad (45)$$

$$V_{\text{lad}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{I}{N} \frac{(I/N) \chi_{(+-, 0)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{1 - (I/N) \chi_{(+-, 0)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}, \quad (46)$$

とおいた (2.2 同様 ω 依存性は無視した)。ここで $\chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}$ 、 $\chi_{(+-, 0)}$ は異方性を考慮した H_0 による帯磁率であり、それぞれ

$$\chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}(\mathbf{q}) \equiv -\sum_{\mathbf{k}, \epsilon} G_{\uparrow}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, \epsilon) G_{\uparrow}^0(\mathbf{k}, \epsilon), \quad (47)$$

$$\chi_{(+-, 0)}(\mathbf{q}) \equiv -\sum_{\mathbf{k}, \epsilon} G_{\uparrow}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, \epsilon) G_{\downarrow}^0(\mathbf{k}, \epsilon), \quad (48)$$

で定義される $G_s^0(\mathbf{k}, \epsilon)$ は spin、波数、周波数がそれぞれ s, \mathbf{k}, ϵ の相互作用がない時の Green 関数)。

spin 空間の回転対称性がある系では $\chi_{(\uparrow\uparrow, 0)} = \chi_{(+-, 0)}$ が成立し、第2章で紹介したように今までの理論はこの仮定を用いていた。しかし対称性が破れている系では成立しない。そこで異方性の効果を現象論的に

$$\chi_{(+-, 0)} = \alpha \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)} \quad (49)$$

によって取り込むことにする。以下の計算では Green 関数をあからさまに用いないので、 α を磁気ゆらぎの異方性パラメーターとして用いることにする。

4.2 磁気ゆらぎと Cooper pair の一般的な関係式

4.1 のように磁気ゆらぎの異方性を取り入れると、当然磁気ゆらぎを媒介とした Cooper pair 間の有効相互作用も、spin 空間の回転対称性を失う。そこで 2.2 の議論を spin 空間の回転対称性を破った場合に拡張することが必要になる。singlet では Cooper pair の spin は \uparrow と \downarrow に固定されていたが、triplet では一般に 4 通り存在するため、singlet の計算に比べて spin 添え字の取り扱いが複雑になる。この点を見通じよくする為、先に spin に関する和を取る方法を用いる。つまり

$$\sum_s a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}'s} = \frac{1}{2} \sum_{ss'\bar{s}\bar{s}'} (\sigma_{ss'}^0 \sigma_{\bar{s}'\bar{s}}^0 + \sigma_{ss'}^3 \sigma_{\bar{s}'\bar{s}}^3) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\bar{s}'} a_{\mathbf{k}'\bar{s}}, \quad (50)$$

$$\sum_s a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}'s} = \frac{1}{2} \sum_{ss'\bar{s}\bar{s}'} (\sigma_{ss'}^1 \sigma_{\bar{s}'\bar{s}}^1 + \sigma_{ss'}^2 \sigma_{\bar{s}'\bar{s}}^2) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\bar{s}'} a_{\mathbf{k}'\bar{s}}, \quad (51)$$

$$\sum_s a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}'s} = \frac{1}{2} \sum_{ss'\bar{s}\bar{s}'} (\sigma_{ss'}^1 \sigma_{\bar{s}'\bar{s}}^1 - \sigma_{ss'}^2 \sigma_{\bar{s}'\bar{s}}^2) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\bar{s}'} a_{\mathbf{k}'\bar{s}}, \quad (52)$$

という書き換えを用いると、磁気ゆらぎを媒介とする有効相互作用はまとめられて

$$H_{1,\text{eff.}} = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \sum_{ss'\bar{s}\bar{s}'} [-(\sigma_{s's}^0 \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^0 + \sigma_{s's}^3 \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^3) V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ + (\sigma_{s's}^1 \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^1 + \sigma_{s's}^2 \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^2) V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ - (\sigma_{s's}^1 \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^1 - \sigma_{s's}^2 \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^2) V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] a_{k's}^\dagger a_{-k's'}^\dagger a_{-k'\bar{s}'} a_{k'\bar{s}}, \quad (53)$$

と表すことができる⁹。ここで $\sigma^a (a = 1, 2, 3)$ は Pauli 行列、 σ^0 は単位行列を表す。また $\sigma_{s's'}^i \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^i = \sigma_{s's}^i \sigma_{\bar{s}\bar{s}}^i$ を用いた。更に $H_{1,\text{eff.}}$ を

$$H_{1,\text{eff.}} = -\frac{1}{2} \sum_{kk'} V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sum_{ss'} \sigma_{s's}^0 a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger \sum_{\bar{s}\bar{s}'} a_{-k'\bar{s}'} a_{k'\bar{s}} \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^0 \\ - \frac{1}{2} \sum_{kk'} V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sum_{ss'} \sigma_{s's}^3 a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger \sum_{\bar{s}\bar{s}'} a_{-k'\bar{s}'} a_{k'\bar{s}} \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^3 \\ - \frac{1}{2} \sum_{kk'} (V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \sum_{ss'} \sigma_{s's}^1 a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger \sum_{\bar{s}\bar{s}'} a_{-k'\bar{s}'} a_{k'\bar{s}} \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^1 \\ + \frac{1}{2} \sum_{kk'} (V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \sum_{ss'} \sigma_{s's}^2 a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger \sum_{\bar{s}\bar{s}'} a_{-k'\bar{s}'} a_{k'\bar{s}} \sigma_{\bar{s}\bar{s}'}^2, \quad (54)$$

と書き直しておく。この $H_{1,\text{eff.}}$ の形から次式で定義される t-operator¹⁰を導入すると便利である [27]。

$$t_k^0 = \sum_{ss'} \sigma_{ss'}^2 a_{-ks} a_{ks'}, \quad (55)$$

$$t_k^a = \sum_{ss'} (-i)(\sigma^2 \sigma^a)_{ss'} a_{-ks} a_{ks'}, \quad \text{for } a = 1, 2, 3. \quad (56)$$

この t-operator を用いると $a_{-ks} a_{k\bar{s}}$ は

$$a_{-ks} a_{k\bar{s}} = -\frac{1}{2} \sigma_{\bar{s}\bar{s}}^2 t_k^0 + \frac{i}{2} \sum_a (\sigma^a \sigma^2)_{\bar{s}\bar{s}} t_k^a, \quad (57)$$

と表されることがわかる¹¹。この $a_{-ks} a_{k\bar{s}}$ の形と Pauli 行列の性質

$$\text{Tr}[\sigma^i \sigma^j] = 2\delta_{ij}, \quad (58)$$

$$\text{Tr}[\sigma^i \sigma^2 \sigma^j] = \begin{cases} 2 & (i, j) = (0, 2) \text{ or } (2, 0), \\ 2i & (i, j) = (1, 3), \\ -2i & (i, j) = (3, 1), \end{cases} \quad (59)$$

⁹以下、 H につく下付き添え字 1 は Hamiltonian のうち相互作用項を意味するものとする

¹⁰ t_k^a は Leggett 自身の定義と $-i$ だけ異なることに注意。また通常の筆者の d ベクトルの定義と一致させるには (56) 式右辺を -1 倍する必要がある。本質的な結果は変わらないので我々は (56) 式の定義で議論を進める。尚 t-operator という用語は我々の造語

¹¹t-operator の定義が天下り的なので補足しておく。そもそも t-operator を (55)(56) と定義したのは (57) が元になっている。すなわち $a_{-ks} a_{k\bar{s}}$ を Cooper pair の消滅演算子と考えると、この形は singlet と triplet 共に含んだ形になっているので、分離を行うため添え字 $\bar{s}\bar{s}$ に関して Pauli 行列で展開する。その際転置行列を取ったとき符号が反転するのは σ^2 だけであることに注意しよう。転置行列を取ることは Cooper pair の spin を交換することに相当するので、 σ^2 の展開係数が singlet、残りの σ^0 、 σ^1 、 σ^3 の展開係数が triplet に相当する。この展開係数を逆に $a_{-ks} a_{k\bar{s}}$ を用いて書き直したのが (55)(56) である。尚 t^0 と形式をそろえるため、 t_k^a において σ^0 、 σ^1 、 σ^3 を $\sigma^2 \sigma^a$ ($a = 1, 2, 3$) と取り直している。本文 (61)(62) において波数に関する対称性について考察しているのであわせて参照されたい

を用いると

$$\begin{aligned}
 H_{1,\text{eff.}} = & \frac{1}{2} \sum_{kk'} (V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) t_k^{0\dagger} t_{k'}^0 \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{kk'} V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (t_k^{1\dagger} t_{k'}^1 + t_k^{2\dagger} t_{k'}^2) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{kk'} (V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) t_k^{3\dagger} t_{k'}^3,
 \end{aligned} \tag{60}$$

と $H_{\text{eff.}}$ は t-operator のみで表現できることがわかる。

ここで t-operator の性質を調べておこう。まず t_{-k}^0 を調べると

$$\begin{aligned}
 t_{-k}^0 &= \sum_{ss'} \sigma_{ss'}^2 a_{ks} a_{-ks'} \\
 &= - \sum_{ss'} \sigma_{ss'}^2 a_{-ks'} a_{ks} \\
 &= \sum_{ss'} \sigma_{s's}^2 a_{-ks'} a_{ks} \\
 &= t_k^0,
 \end{aligned} \tag{61}$$

がわかる。同様に t_{-k}^a を調べると

$$\begin{aligned}
 t_{-k}^a &= \sum_{ss'} (-i)(\sigma^2 \sigma^a)_{ss'} a_{ks} a_{-ks'} \\
 &= - \sum_{ss'} (-i)(\sigma^2 \sigma^a)_{ss'} a_{-ks'} a_{ks},
 \end{aligned} \tag{62}$$

ここで $(\sigma^2 \sigma^a)_{ss'} = ({}^t(\sigma^a){}^t(\sigma^2))_{s's}$ だが ${}^t\sigma^a = -\sigma^2 \sigma^a \sigma^2$ が成り立つことを用いると $t_{-k}^a = -t_k^a$ が導かれる。一方、Cooper pair において singlet は spin の交換に関して反対称、triplet は対称である。よって pair の交換に相当する $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ に対して、singlet は対称、triplet は反対称でなければならない。以上から t_k^0 は singlet、 t_k^a は triplet の operator であることがわかる。

次に $H_{1,\text{eff.}}$ の平均場近似を考える。singlet pair と triplet pair は共存しないことを要請すれば、singlet、triplet に対する平均場近似での相互作用はそれぞれ

$$H_{1,\text{sin.}} = \frac{1}{4} \sum_{kk'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (\langle t_{k'}^0 \rangle^* t_k^0 + \langle t_{k'}^0 \rangle t_k^{0\dagger}), \tag{63}$$

$$H_{1,\text{tri.}} = \frac{1}{4} \sum_{kk'a} V_{\text{tri.,a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (\langle t_{k'}^a \rangle^* t_k^a + \langle t_{k'}^a \rangle t_k^{a\dagger}), \tag{64}$$

と書かれる。ただし

$$V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')], \tag{65}$$

$$V_{\text{tri.,1}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = V_{\text{tri.,2}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv -2V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \tag{66}$$

$$V_{\text{tri.,3}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')], \tag{67}$$

とおいた。よって gap 方程式

singlet

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{sin.}}(\mathbf{k}')), \quad (68)$$

triplet

$$d^a(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{tri.a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') d^a(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{tri}}(\mathbf{k}')), \quad (69)$$

が得られる（導出は Appendix において行った。 $\Theta(E_{\text{sin.}}(\mathbf{k}'))$ 、 $\Theta(E_{\text{tri}}(\mathbf{k}'))$ は (13)～(15) 参照。またギャップ関数 $\Delta(\mathbf{k})$ 、 $d^a(\mathbf{k})$ は t-operator の期待値を使って定義される。(110)(111) に具体的な定義を与えた）。

ここで計算のチェックのためにスピン空間に関して対称性がある場合を考えておこう。この場合には $V_{\text{re}} + V_{\text{rae}} = V_{\text{lad}}$ が成立するので gap 方程式は

singlet

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] \Delta(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{sin.}}(\mathbf{k}')), \quad (70)$$

triplet

$$d^a(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} 2V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') d^a(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{tri}}(\mathbf{k}')), \quad (71)$$

と表すことができる。特に Stoner 条件を満たす直前 (i.e. $\frac{1}{1-(I/N)\chi_0} \gg 1$)¹²では

$$2[V_{\text{rae}} + V_{\text{lad}}] \simeq 3V, \quad (72)$$

$$2[V_{\text{re}}] \simeq V, \quad V = \frac{I/N}{1 - (I/N)\chi_0}, \quad (73)$$

と近似できるので、これを (68)(69) に代入すると第 2 章で与えた (11)(12) となる¹³。

さて spin 空間の回転対称性がある場合には (71) のギャップ方程式は d ベクトルの方向に依存しない。しかし spin 空間の回転対称性が破れている場合の (66) (67) では、ギャップ方程式は d ベクトルの方向に依存する形をしている。これは第 3 章終わりで述べたことの数式における表現に他ならない。これは大切な事なので繰り返し述べる。 d ベクトルの向きには Cooper pair の spin と垂直な方向である、という物理的な意味がある [28]。この視点に立つと spin ゆらぎが等方的な場合には、 d ベクトルは特定の方向を prefer しない事がわかる。しかし spin ゆらぎが非等方的な場合、Cooper pair の spin は特定の方向を向きやすくなると考えられる¹⁴。ここで導出したギャップ方程式はまさにこの物理的な描像を表現していると考えられる。

以上から t-operator を用いた拡張により、ギャップ方程式を spin ゆらぎが異方的な場合に拡張することができた。その結果、spin ゆらぎの異方性によって d ベクトルの方向に異方性が現れることが表現できたのである。以下この拡張されたギャップ方程式を用いて Sr_2RuO_4 において実現する order parameter を弱結合近似のもとで評価していこう。

¹² spin 空間の対称性があるので $\chi_{(11, 0)} = \chi_{(+-, 0)} \equiv \chi_0$ が成立する

¹³ 第 2 章では相互作用は δ 関数型であり、この章では格子上の Hubbard 型としたので、 I の分母が Ω であるか N であるかの違いはある

¹⁴ 具体的にどの方向を向きやすくなるかは系に依存する

4.3 T_c の評価

実現する order は、最も高い転移温度を与える order であると考えられる。そこで (68) (69) をもとに転移温度を評価する。 T_c 近傍のギャップ方程式をまとめて

$$\phi(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V_\phi(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi(\mathbf{k}') \frac{1}{2\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{\beta_c \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}')}{2}, \quad (74)$$

と表すことにする。ただし $V_\phi(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は (65)(66)(67) より

$$\phi : \text{singlet} \longrightarrow V_\phi = 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')], \quad (75)$$

$$\phi : \text{triplet and } \mathbf{d} \parallel xy \longrightarrow V_\phi = -2V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (76)$$

$$\phi : \text{triplet and } \mathbf{d} \parallel z \longrightarrow V_\phi = 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')], \quad (77)$$

というように ϕ の表す Cooper pair によって決めるものとする。

Sr₂RuO₄ の ab 面内におけるコヒーレンス長は 660 Å と十分長い (たとえば [29] 参照)。よって $\phi(\mathbf{k})$ は Fermi 面近傍でのみ有限の値を取ると期待できる。そこで動径方向 $\mathbf{u}_1 \equiv \nabla \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) / |\nabla \bar{\varepsilon}(\mathbf{k})|$ をひとつの単位ベクトルとする直交曲線座標 $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3)$ に座標変換を行う¹⁵。

$$\text{i.e. } \mathbf{k} = x_1 \mathbf{u}_1 + x_2 \mathbf{u}_2 + x_3 \mathbf{u}_3 \quad (78)$$

このとき

$$\phi(\mathbf{k}) = \phi_0(x_2, x_3) \theta(k_c - |x_1 - x_F|), \quad (79)$$

と仮定する。ただし x_F は Fermi 面における x_1 の値であり、 $\phi_0(x_2, x_3)$ の x_1 依存性は無視した。これをギャップ方程式に代入すると

$$\begin{aligned} & \phi_0(x_2, x_3) \theta(k_c - |x_1 - x_F|) \\ &= - \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int dx'_1 dx'_2 dx'_3 |J(x'_1, x'_2, x'_3)| V_\phi(x_1 - x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3) \\ & \quad \times \phi_0(x'_2, x'_3) \theta(k_c - |x'_1 - x_F|) \frac{1}{2\bar{\varepsilon}(x'_1)} \tanh \frac{\beta_c \bar{\varepsilon}(x'_1)}{2}, \end{aligned} \quad (80)$$

となる。ただし $\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \bar{\varepsilon}(x_1)$ が成り立つことを用いた。

両辺に $\theta(k_c - |x_1 - x_F|)$ を掛けて x_1 に関して積分する。その際 $\frac{1}{2\bar{\varepsilon}(x'_1)} \tanh \frac{\beta_c \bar{\varepsilon}(x'_1)}{2}$ 以外の x_1, x'_1 は x_F で近似する。

$$\begin{aligned} \phi_0(x_2, x_3) &= - \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int dx'_2 dx'_3 |J(x_F, x'_2, x'_3)| V_\phi(0, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3) \phi_0(x'_2, x'_3) \\ & \quad \times \int dx'_1 \theta(k_c - |x'_1 - x_F|) \frac{1}{2\bar{\varepsilon}(x'_1)} \tanh \frac{\beta_c \bar{\varepsilon}(x'_1)}{2}. \end{aligned} \quad (81)$$

更に上式両辺 $\phi_0(x_2, x_3) |J(x_F, x_2, x_3)|$ を掛けて x_2, x_3 について積分すると

$$\int dx_2 dx_3 |J(x_F, x_2, x_3)| \phi_0^2(x_2, x_3)$$

¹⁵ 本論文で計算するのは 2 次元系なので \mathbf{u}_3 は必要ない。しかし以下の導出は一般的な 3 次元系を想定して行う

$$\begin{aligned}
 = & -\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int dx_2 dx_3 |J(x_F, x_2, x_3)| \int dx'_2 dx'_3 |J(x_F, x'_2, x'_3)| \\
 & \times V_\phi(0, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3) \phi_0(x_2, x_3) \phi_0(x'_2, x'_3) \\
 & \times \int_{\text{cut-off}} dx'_1 \frac{1}{2\bar{\varepsilon}(x'_1)} \tanh \frac{\beta_c \bar{\varepsilon}(x'_1)}{2}
 \end{aligned} \quad (82)$$

以上から

$$1 = -\langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\text{cut-off}} d\mathbf{k} \frac{1}{2\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{\beta_c \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}')}{2}, \quad (83)$$

が得られる。ただし

$$\langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.} \equiv -\frac{\int_{F.S.} d\mathbf{k} \int_{F.S.} d\mathbf{k}' V_\phi(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi_0(\mathbf{k}) \phi_0(\mathbf{k}')}{[\int_{F.S.} d\mathbf{k}] \int_{F.S.} d\mathbf{k} \phi_0^2(\mathbf{k})}, \quad (84)$$

$$\int_{F.S.} d\mathbf{k} \equiv \int dx_2 dx_3 |J(x_F, x_2, x_3)| \quad (85)$$

と定義した。

(28) の導出と同様の議論を行うと T_c の評価式

$$k_B T_c = 1.13 \hbar v_F k_c \exp \left[-\frac{1}{N(0) \langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.}} \right], \quad (86)$$

を導くことができる。

上式から最大の T_c を与える order parameter は最大の $N(0) \langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.}$ を与える order と言える。また (83) において $\langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.} < 0$ の時両辺の符号は合わない。そこで $\langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.} < 0$ を与える ϕ は実現し得ないといえる。

5 Sr_2RuO_4 への応用

第4章の議論に基づき、 Sr_2RuO_4 に対して $N(0) \langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.}$ を計算していく。そして等方的な場合、singlet が favor されるが、異方性を強くしていくと triplet に有利に働き、ある値を境に逆転が起こることを見ていく。

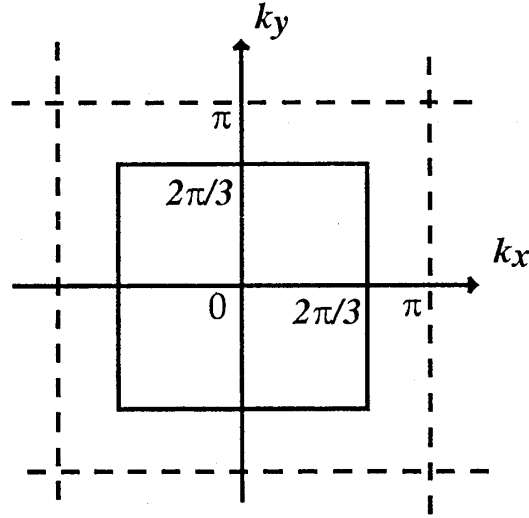
5.1 Coupling Constant の評価

第1章で述べた通り、 Sr_2RuO_4 の Fermi 面を横切るバンドは3つある。しかし NMR によって Sr_2RuO_4 の spin 密度は γ 面が最も大きいと報告されている [25]。そこで簡単のため、Ru-4d_{xy} 軌道に由来する γ 面のみ考慮することにする。また図4より γ 面は正方形に近いので、図11のように近似する。

さて $N(0) \langle\langle V_\phi \rangle\rangle_{F.S.}$ を計算するには Fermi 面の形以外に order parameter $\phi(\mathbf{k})$ の関数形、及び V_ϕ の関数形を与えなければならない。その決め方を順に述べる。

まず $\phi(\mathbf{k})$ の関数形だが、3.1 で述べた通り可能な order parameter は群論によって絞り込むことができる [15]。その分類に従い

$$\phi_1(\mathbf{k}) = \cos k_x + \cos k_y, \quad (87)$$

図 11: 近似的な Fermi 面 (γ 面)

$$\phi_2(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y, \quad (88)$$

$$\phi_3(\mathbf{k}) = \sin k_x \sin k_y, \quad (89)$$

$$\phi_4(\mathbf{k}) = \sin k_x, \quad (\hat{\mathbf{d}} \perp c), \quad (90)$$

$$\phi_5(\mathbf{k}) = \sin k_x, \quad (\hat{\mathbf{d}} \parallel c), \quad (91)$$

を選ぶことにした。ここで (34)(35) より ϕ_1 から ϕ_3 までは singlet、 ϕ_4, ϕ_5 が triplet に相当する。我々は Sr₂RuO₄ で実現している可能性の高い $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ の代わりに $\phi_5 = \sin k_x$ を用いるがその理由は次の通りである。

現在我々が扱っているアプローチは転移温度近傍であるので、この領域で $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ のギャップ方程式は (74) より

$$\text{Re} \quad \sin k_x = - \sum V_{\text{tri},z}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sin k'_x \frac{1}{2\bar{\epsilon}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{\beta_c \bar{\epsilon}(\mathbf{k}')}{2}, \quad (92)$$

$$\text{Im} \quad \sin k_y = - \sum V_{\text{tri},z}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sin k'_y \frac{1}{2\bar{\epsilon}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{\beta_c \bar{\epsilon}(\mathbf{k}')}{2}, \quad (93)$$

と実部と虚部が完全に分離する (これは T_c 近傍を考えているからであり、 T_c より十分低温では $\bar{\epsilon}(\mathbf{k}) \rightarrow \sqrt{\bar{\epsilon}^2(\mathbf{k}) + \sin^2 k_x + \sin^2 k_y}$ と変更されるのでこのような分離は起こらない)。(92) からわかるように我々のアプローチでは $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ と $\hat{z} \sin k_x$ は同じ T_c を与える。そこで $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ の代わりに ϕ_5 を考えることにした。ただし T_c より十分低温領域では、エネルギーギャップが開いているほど自由エネルギーは下がるので、 $\hat{z} \sin k_x$ より $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ が実現すると考えた方が自然である。よって ϕ_5 が最も高い転移温度を与えることを示せば $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ が実現すると判断することにした。

次に V_ϕ を決める。 V_ϕ の定義 (75)~(77)

$$\phi : \text{singlet} \longrightarrow V_\phi = 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')],$$

$$\phi : \text{triplet and } \mathbf{d} \parallel xy \longrightarrow V_\phi = -2V_{\text{re}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$$\phi : \text{triplet and } \mathbf{d} \parallel z \longrightarrow V_\phi = 2[V_{\text{rae}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V_{\text{lad}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')],$$

及び V_{re} 、 V_{rae} 、 V_{lad} の定義 (44)~(46)

$$\begin{aligned} V_{\text{re}}(k - k') &= \frac{I}{N} \frac{(I/N) \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}(k - k')}{1 - (I/N)^2 \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}^2(k - k')}, \\ V_{\text{rae}}(k - k') &= \frac{I}{N} \frac{(I/N)^2 \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}^2(k - k')}{1 - (I/N)^2 \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}^2(k - k')}, \\ V_{\text{lad}}(k - k') &= \frac{I}{N} \frac{(I/N) \chi_{(+-, 0)}(k - k')}{1 - (I/N) \chi_{(+-, 0)}(k - k')}, \end{aligned}$$

及び異方性の仮定 (49) から $\chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}$ の具体的な値が必要なので図 8 の $\chi_{0, \text{band}}(q)$ をパラメーターフィットしたものを用いることにする。実際 Mazin と Singh は図 8 を

$$\chi_{\text{band}}(q) = \chi_{\text{band}}(0) + \chi_{n, \text{band}}(q) \quad (94)$$

$$\begin{aligned} \chi_{n, \text{band}}(q) &= A(\cos(k_x) + \cos(k_y)) + B(\cos(2k_x) + \cos(2k_y)) \\ &\quad + C(\cos(3k_x) + \cos(3k_y)) - 2(A + B + C), \quad (95) \\ (A &= -0.103, B = -0.044, C = 0.037), \end{aligned}$$

という形で関数フィットしている [21] ので、この結果を援用する ($\chi_{n, \text{band}}(q)$ は $\chi_{n, \text{band}}(q = 0) = 0$ となるように定義されている。ただし添え字 n はネスティングの意味である)。

V_{re} 、 V_{rae} 、 V_{lad} の表式からわかるように、具体的な T_c の評価には

$$S(q) = \frac{I}{N} \chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}(q), \quad (96)$$

が必要である。しかしバンド計算の結果 (95) をそのまま用いると $q_0 \equiv (\pm 2\pi/3, \pm 2\pi/3)$ において $S(q_0) = 1.02 > 1$ となり [21]、磁気秩序が出現するという結論が得られてしまう。これは Sr_2RuO_4 が Fermi 液体でよく記述できることと明らかに反する。そこでバンド計算に取り入れていない多体効果によって、ネスティングの効果が抑えられると仮定して

$$\chi_{(\uparrow\uparrow, 0)}(q) = \chi(0) + a_{\text{nest}} \chi_{n, \text{band}}(q) \quad (97)$$

という帯磁率を用いることにする。ここで a_{nest} は現象論的パラメーターとする。つまり波数依存性はバンド計算の結果と大きく変わらないが、全体の大きさはバンド計算と異なると考え a_{nest} を導入した。また

$$S(0) = \frac{I}{N} \chi(0) \quad (98)$$

については既に幾つかの研究で 0.8 程度と見積もられているので、我々も $S(0) = 0.8$ という値を用いる。

後に実験との比較を考える上では、現象論的パラメーター a_{nest} を用いるよりも $S(q_0)$ ($q_0 = (\pm 2\pi/3, \pm 2\pi/3)$) を用いる方が有用だと思われるので、 $S(q_0)$ をパラメーターと選びなおす。 a_{nest} との関係は

$$S(q_0) = S(0) + \frac{I}{N} a_{\text{nest}} \chi_{n, \text{band}}(q_0) \quad (99)$$

である。これを a_{nest} について解いて $S(q)$ に代入すると

$$S(q) = S(0) + (S(q_0) - S(0)) \frac{\chi_{n, \text{band}}(q)}{\chi_{n, \text{band}}(q_0)} \quad (100)$$

と書ける。

このように求められた $S(\mathbf{q})$ を用いて $\phi_1 \sim \phi_5$ に対する有効相互作用は

$$N(0)V_{\phi_2}(\mathbf{q}) = 2S(0) \left[\frac{S^2(\mathbf{q})}{1 - S^2(\mathbf{q})} + \frac{\alpha S(\mathbf{q})}{1 - \alpha S(\mathbf{q})} \right], \quad (101)$$

$$N(0)V_{\phi_4}(\mathbf{q}) = -2S(0) \frac{S(\mathbf{q})}{1 - S^2(\mathbf{q})}, \quad (102)$$

$$N(0)V_{\phi_5}(\mathbf{q}) = 2S(0) \left[\frac{S^2(\mathbf{q})}{1 - S^2(\mathbf{q})} - \frac{\alpha S(\mathbf{q})}{1 - \alpha S(\mathbf{q})} \right], \quad (103)$$

と表される。ただし singlet の有効相互作用は共通なので

$$N(0)V_{\phi_1} = N(0)V_{\phi_2} = N(0)V_{\phi_3} \quad (104)$$

に注意しよう。

5.2 計算結果

我々の目標は最も大きな T_c を与える order parameter をパラメーターを変えて求めるということであるから、式 (101)~(103) で得られた $N(0)V_\phi$ を用いて (84) を計算すれば良い。パラメーターとしては $S(\mathbf{q}_0)$ と異方性パラメーター α の2つである。ネスティングによる反強磁性的ゆらぎが観測されていることからわかるように、 $S(0) < S(\mathbf{q}_0)$ である。そこで 0.01 刻みで $S(\mathbf{q}_0) = 0.90$ から 0.99 に対して $N(0)\langle\langle V_{\phi_1} \rangle\rangle_{F.S.} \sim N(0)\langle\langle V_{\phi_5} \rangle\rangle_{F.S.}$ を計算し、異方性パラメーターが singlet と triplet (及び \mathbf{d} ベクトルの方向) の競合にどのような関わっているか調べた。

計算を行ってみると $N(0)\langle\langle V_{\phi_n} \rangle\rangle_{F.S.}$ の α 依存性は、定性的に $S(\mathbf{q}_0)$ に依存しない事がわかった。そこで $S(\mathbf{q}_0) = 0.95$ の計算結果のみ紹介する。 $\phi_1 \sim \phi_5$ に対して $N(0)\langle\langle V_{\phi_n} \rangle\rangle_{F.S.}$ の α 依存性をまとめて図 12 に示す。

この図から最も $N(0)\langle\langle V_{\phi_n} \rangle\rangle_{F.S.}$ が大きく、高い T_c を与えるのは ϕ_2 の singlet か ϕ_5 の triplet であることがわかる。更に異方性が強く、 $\alpha < 0.84$ では AF ゆらぎであるにもかかわらず triplet が最も強い引力となることが示された。

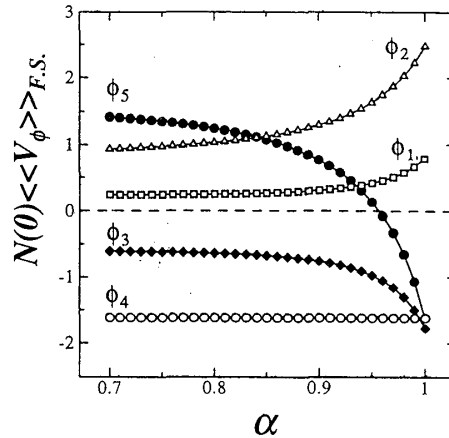


図 12: $S(\mathbf{q}_0) = 0.95, \alpha = 0.70 \sim 1.00$ における $N(0)\langle\langle V_{\phi_n} \rangle\rangle_{F.S.} (n = 1 \sim 5)$

singlet に対する $N(0)\langle\langle V_{\phi n}\rangle\rangle_{F.S.}$ ($n = 1, 2, 3$) はいずれも異方性を強くしていく（すなわち α を減少させる）と、その絶対値が小さくなることがわかる。これは (101) より、異方性を強くしていくと singlet pair 間の相互作用が弱められることに起因する。このように異方性は singlet pair 間の相互作用を弱める働きがある。 ϕ_1 から ϕ_3 を比較すると最も高い転移温度を与える order parameter は ϕ_2 であることがわかる。 ϕ_3 は $N(0)\langle\langle V_{\phi 3}\rangle\rangle_{F.S.} < 0$ なので、実現しない。また ϕ_1 は extended s 波、 ϕ_2 は d 波なので、反強磁性ゆらぎにより ϕ_2 が最も有利である。

一方 triplet に対する $N(0)\langle\langle V_{\phi 4}\rangle\rangle_{F.S.}$ は一定値を取るが、これは (102) に α 依存性がないことによる。一方、 $N(0)\langle\langle V_{\phi 5}\rangle\rangle_{F.S.}$ は異方性を強くしていくと、増大することがわかる。この振る舞いは (103) において、 α を減少させると第 2 項が小さくなることに起因していると考えられる。

さて異方性を導入する前では $N(0)\langle\langle V_{\phi 4}\rangle\rangle_{F.S.} = N(0)\langle\langle V_{\phi 5}\rangle\rangle_{F.S.} < 0$ より、triplet pair は実現し得なかった。しかし異方性を導入することによって、正負が反転し、実現し得る order parameter になった事に注目して欲しい。またこの結果は d ベクトルが xy 平面ではなく、 z 軸を向いている pair しか実現し得ない事を含むが、 Sr_2RuO_4 の d ベクトル $\hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ と consistent になっている。このように磁気ゆらぎの異方性を考慮することによって、 d ベクトルが z 軸を向いていることは自然に理解できることがわかった。

我々は $S(q_0)$ の値をいろいろと変えて、各 $S(q_0)$ に対して singlet と triplet が入れ替わるときの α を決定した。こうして得られた $S(q_0)$ 、 α をパラメーターとする相図が次のように得られた。

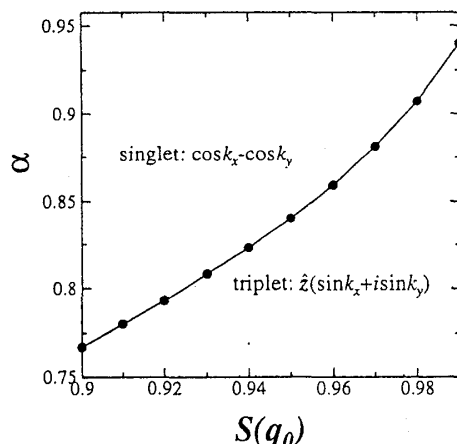


図 13: ϕ_2 と ϕ_5 の競合

5.3 結果の解釈

我々のモデルによって、異方性を強くしていくと singlet と triplet の競合が起こり、triplet pair が実現し得ることが導かれた。よって d ベクトルの方向、triplet 超伝導、いずれのメカニズムにも、磁気ゆらぎの異方性が重要な役割を果たしていることがわかった。また異方性を取り入れないと、singlet が favor されることも導かれるので、今までの研究とも consistent である。

ここで何故反強磁性ゆらぎであるにもかかわらず、tripletが有利になるのか、という物理的原因を考えてみることにしよう。(101)、(103)を比較するとわかるように、 α が有限の値を持つとき、必ず $N(0)V_{\phi_2} > N(0)V_{\phi_5}$ が成立する。 $N(0)V_{\phi_2}$ と $N(0)V_{\phi_5}$ が一致するのは $\alpha = 0$ (異方性が強い極限) の時だけである。それなのに何故 $\alpha < 0.84$ で triplet が実現するのであろうか？

実際 $N(0)\langle\langle V_{\phi_5} \rangle\rangle_{F.S.} > N(0)\langle\langle V_{\phi_2} \rangle\rangle_{F.S.}$ が実現する $S(\mathbf{q}_0) = 0.95$ 、 $\alpha = 0.84$ において $N(0)V_{\phi_2}$ と $N(0)V_{\phi_5}$ の波数依存性を図示すると図14、図15のようになる。

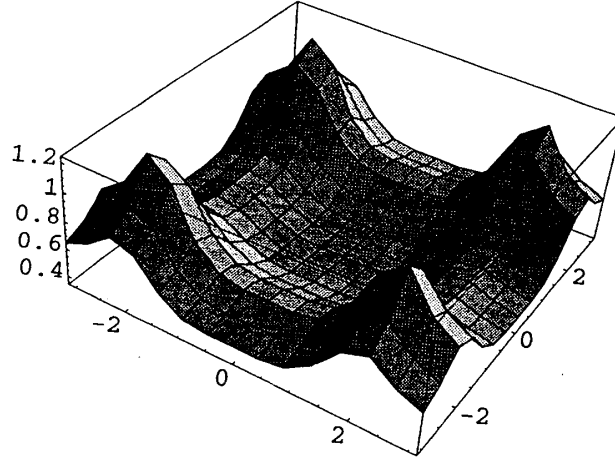


図 14: $S(\mathbf{q}_0) = 0.95$ 、 $\alpha = 0.84$ における $N(0)V_{\phi_2}$ の波数依存性

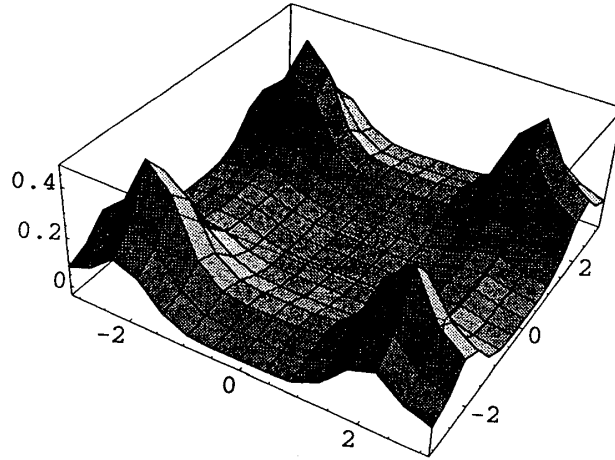


図 15: $S(\mathbf{q}_0) = 0.95$ 、 $\alpha = 0.84$ における $N(0)V_{\phi_5}$ の波数依存性

明らかに $N(0)V_{\phi_5}$ に比べて $N(0)V_{\phi_2}$ の方が大きいことがわかる。このように一見 triplet に不利な状況にも関わらず、Fermi 面上で平均した場合に $N(0)\langle\langle V_{\phi_5} \rangle\rangle_{F.S.} > N(0)\langle\langle V_{\phi_2} \rangle\rangle_{F.S.}$ となるのはどうしてであろうか？

この点を定性的に理解するために、我々は次のように考えた。図14、15からわかるように $N(0)V_{\phi_2}$ 、 $N(0)V_{\phi_5}$ とも、 \mathbf{q}_0 にピークを持ち、それ以外では大体 Flat という特徴を

もっている。この特徴を非常に単純化し、

$$N(0)V_{\phi_n}(\mathbf{q}) = A_n[\delta(q_x \pm 2\pi/3) + \delta(q_x \pm 4\pi/3) + \cdots][\delta(q_y \pm 2\pi/3) + \delta(q_y \pm 4\pi/3) + \cdots] + B_n \quad (105)$$

と近似する¹⁶。ここで A_n はピークの値によって決まると考える。このように近似すると $N(0)\langle\langle V_{\phi_n} \rangle\rangle_{F.S.}$ ($n = 2, 5$) は解析的に求めることができ

$$N(0)\langle\langle V_{\phi_2} \rangle\rangle_{F.S.} = [-2.79 \times 10^{-2}\delta(0) + 4.91 \times 10^{-2}]A_2, \quad (106)$$

$$N(0)\langle\langle V_{\phi_5} \rangle\rangle_{F.S.} = [4.24 \times 10^{-2}\delta(0) + 5.06 \times 10^{-2}]A_5. \quad (107)$$

と書ける。これから ϕ_2 の Cooper pair よりも ϕ_5 の Cooper pair の方が \mathbf{q}_0 のピークを強く感じる、と解釈することができる。今の議論では δ 関数で近似したが、より正確に扱うには Gauss 分布で近似するべきであろう。しかし δ 関数が Gauss 分布の極限として特徴付けられるので、どちらのアプローチで行ってもこの定性的な結論は変わらないと考えている。以上の考察から $N(0)V_{\phi_2} > N(0)V_{\phi_5}$ かつ $N(0)\langle\langle V_{\phi_5} \rangle\rangle_{F.S.} > N(0)\langle\langle V_{\phi_2} \rangle\rangle_{F.S.}$ であつても不思議ではない。

6 まとめ

我々は Sr_2RuO_4 の超伝導メカニズムを説明するため、磁気ゆらぎに基づく超伝導メカニズムを再検討した。そして磁気ゆらぎに異方性がある場合にも成立する、一般的なギャップ方程式を導出した。磁気ゆらぎに現象論的な異方性を導入し、 Sr_2RuO_4 において実現する order を評価したところ、異方性を強くしていくと Sr_2RuO_4 の d ベクトル $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \hat{z}(\sin k_x \pm i \sin k_y)$ が最も安定化することがわかった。我々の結果は AF ゆらぎを仮定して triplet 超伝導が安定化することを示した最初の研究である。

しかし我々の評価方法はあくまで第一ステップ的なものに過ぎない。今後磁気ゆらぎの異方性と超伝導の関係について研究が発展することを期待したい。

A ギャップ方程式の導出

本文で用いたギャップ方程式の導出を行う。相互作用として (63)、(64) を用いると、singlet/triplet に対する Hamiltonian はそれぞれ

$$H_{\text{sin.}} = \sum_{\mathbf{k}s} \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (\langle t_{\mathbf{k}}^{0\dagger} \rangle t_{\mathbf{k}'}^0 + \langle t_{\mathbf{k}'}^0 \rangle t_{\mathbf{k}}^{0\dagger}), \quad (108)$$

$$H_{\text{tri.}} = \sum_{\mathbf{k}s} \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'a} V_{\text{tri.,a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (\langle t_{\mathbf{k}}^a \rangle^* t_{\mathbf{k}'}^a + \langle t_{\mathbf{k}'}^a \rangle t_{\mathbf{k}}^{a\dagger}), \quad (109)$$

で与えられる (t -operator の定義は (55)(56) を参照)。もしくはギャップ関数を

$$\Delta(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle t_{\mathbf{k}'}^0 \rangle, \quad (110)$$

¹⁶ δ 関数を足し挙げているのは $V_{\phi_n}(\mathbf{q})$ に周期性を持たせる為である

$$d^{(a)}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{tri.a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle t_{\mathbf{k}'}^{(a)} \rangle, \quad (111)$$

で定義すると

$$H_{\text{sin.}} = \sum_{\mathbf{k}s} \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\Delta^*(\mathbf{k}) t_{\mathbf{k}}^0 + \Delta(\mathbf{k}) t_{\mathbf{k}}^{0\dagger}), \quad (112)$$

$$H_{\text{tri.}} = \sum_{\mathbf{k}s} \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}a} (d^{a*}(\mathbf{k}) t_{\mathbf{k}}^a + d^a(\mathbf{k}) t_{\mathbf{k}}^{a\dagger}), \quad (113)$$

と表すことができる。Hamiltonian を対角化してギャップ方程式を導出することもできるが、より簡単な Gor'kov 方程式に基づくアプローチを紹介する。電子の Green 関数を

$$G(\mathbf{k}, \tau - \tau') = - \sum_s \langle T_\tau [a_{\mathbf{k}s}(\tau) a_{\mathbf{k}s}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (114)$$

によって定義する。ただし

$$\langle T_\tau [a_{\mathbf{k}s}(\tau) a_{\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau')] \rangle = \delta_{ss'} \langle T_\tau [a_{\mathbf{k}s}(\tau) a_{\mathbf{k}s}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (115)$$

$$\langle T_\tau [a_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau')] \rangle = \langle T_\tau [a_{\mathbf{k}\downarrow}(\tau) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (116)$$

$$(117)$$

と仮定した。また T_τ は虚時間 τ に関する時間順序積、 τ 依存性は singlet の場合

$$A(\tau) \equiv \exp[\tau H_{\text{sin.}}] A \exp[-\tau H_{\text{sin.}}], \quad (118)$$

を意味する (triplet に対しても同様)。

A.1 singlet

まず singlet に対するギャップ方程式を導出する。Green 関数の τ 微分は

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}s}, H_{\text{sin.}}] &= \sum_{\mathbf{k}'s'} \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}') [a_{\mathbf{k}s}, a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}] - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \Delta(\mathbf{k}') [a_{\mathbf{k}s}, t_{\mathbf{k}'}^{0\dagger}] \\ &= \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'s'} \Delta(\mathbf{k}') \sigma_{ss'}^2 a_{-\mathbf{k}s'}^\dagger (\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) \\ &= \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s} - \Delta(\mathbf{k}) \sum_{s'} \sigma_{ss'}^2 a_{-\mathbf{k}s'}^\dagger, \end{aligned} \quad (119)$$

¹⁷を用いると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} G(\mathbf{k}, \tau - \tau') &= -2\delta(\tau - \tau') \\ &\quad + \varepsilon(\mathbf{k}) \sum_s \langle T_\tau [a_{\mathbf{k}s}(\tau) a_{\mathbf{k}s}^\dagger(\tau')] \rangle - \Delta(\mathbf{k}) \sum_{ss'} \sigma_{ss'}^2 \langle T_\tau [a_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau) a_{\mathbf{k}s}^\dagger(\tau')] \rangle \\ &= -2\delta(\tau - \tau') - \varepsilon(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, \tau - \tau') + \Delta(\mathbf{k}) F^{0*}(\mathbf{k}, \tau - \tau'), \end{aligned} \quad (120)$$

¹⁷ $\Delta(-\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k})$ を使った

となる。ただし singlet に対する異常 Green 関数を

$$F^{0*}(\mathbf{k}, \tau - \tau') \equiv - \sum_{ss'} \sigma_{ss'}^2 \langle T_\tau [a_{-ks'}^\dagger(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (121)$$

で定義した。

方程式を閉じるために、singlet 異常 Green 関数の τ 微分を計算する。

$$\begin{aligned} [a_{-ks'}^\dagger, H_{\text{sin.}}] &= -\bar{\varepsilon}(-\mathbf{k}) a_{-ks'}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \Delta^*(\mathbf{k}') [a_{-ks'}^\dagger, t_{\mathbf{k}'}^0] \\ &= -\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{-ks'}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \Delta^*(\mathbf{k}') (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}) \sum_{s''} \sigma_{s's''}^2 a_{ks''}^\dagger \\ &= -\varepsilon(\mathbf{k}) a_{-ks'}^\dagger - \Delta^*(\mathbf{k}) \sum_{s''} \sigma_{s's''}^2 a_{ks''}^\dagger, \end{aligned} \quad (122)$$

¹⁸より

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle T_\tau [a_{-ks'}^\dagger(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle = \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) \langle T_\tau [a_{-ks'}^\dagger(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle + \Delta^*(\mathbf{k}) \sum_{s''} \sigma_{s's''}^2 \langle T_\tau [a_{ks''}(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (123)$$

が成り立つ。上式両辺 $-\sigma_{ss'}^2$ かけて s, s' について和をとると singlet 異常 Green 関数に対する微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F^{0*}(\mathbf{k}, \tau - \tau') - \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) F^{0*}(\mathbf{k}, \tau - \tau') = \Delta^*(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, \tau - \tau'), \quad (124)$$

が得られる。

(120)(124) を Fourier 変換すると

$$[i\omega_n - \bar{\varepsilon}(\mathbf{k})] G(\mathbf{k}, \omega_n) + \Delta(\mathbf{k}) F^{0*}(\mathbf{k}, \omega_n) = 2, \quad (125)$$

$$[-i\omega_n - \bar{\varepsilon}(\mathbf{k})] F^{0*}(\mathbf{k}, \omega_n) - \Delta^*(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, \omega_n) = 0, \quad (126)$$

となる (ただし $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ は Fermion に対する松原周波数)。これから

$$G(\mathbf{k}, \omega_n) = -2 \frac{[\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) + i\omega_n]}{\omega_n^2 + \bar{\varepsilon}^2(\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k})\Delta^*(\mathbf{k})}, \quad (127)$$

$$F^{0*}(\mathbf{k}, \omega_n) = 2 \frac{\Delta^*(\mathbf{k})}{\omega_n^2 + \bar{\varepsilon}^2(\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k})\Delta^*(\mathbf{k})}. \quad (128)$$

また $F^{0*}(\mathbf{k}, \tau + \eta - \tau) = \langle t_k^{0\dagger} \rangle$ (η は正の微小量) より

$$\begin{aligned} \Delta^*(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') F^{0*}(\mathbf{k}, \tau + \eta - \tau) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \eta} \frac{2\Delta^*(\mathbf{k}')}{\omega_n^2 + \bar{\varepsilon}^2(\mathbf{k}') + \Delta(\mathbf{k}')\Delta^*(\mathbf{k}')}, \end{aligned} \quad (129)$$

が成り立つ (self consistent condition)。上式複素共役を取り、松原周波数に関して和をとると singlet に対するギャップ方程式

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\text{sin.}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{sin.}}(\mathbf{k}')), \quad (130)$$

が導かれる。

¹⁸ただし $\bar{\varepsilon}(-\mathbf{k}) = \bar{\varepsilon}(\mathbf{k})$ と仮定した

A.2 triplet

以下に示す通り、singlet と全く同様に導出することができる。

$$\begin{aligned} [a_{ks}, H_{\text{tri.}}] &= \sum_{k's'} \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}') [a_{ks}, a_{k's'}^\dagger a_{k's'}] - \frac{1}{2} \sum_{k'a} d^a(\mathbf{k}') [a_{ks}, t_{k'}^{a\dagger}] \\ &= \varepsilon(\mathbf{k}) a_{ks} - \sum_a d^a(\mathbf{k}) \sum_{s'} i(\sigma^a \sigma^2)_{ss'} a_{-ks'}^\dagger. \end{aligned} \quad (131)$$

ただし $d^a(-\mathbf{k}) = -d^a(\mathbf{k})$ 、 $(\sigma^a \sigma^2)_{ss'} = (\sigma^a \sigma^2)_{s's}$ を用いた。triplet に対する異常 Green 関数を

$$F^{a*}(\mathbf{k}, \tau - \tau') \equiv - \sum_{ss'} (\sigma^a \sigma^2)_{ss'} \langle T_\tau [a_{-ks'}^\dagger(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (132)$$

と定義すると

$$\frac{\partial}{\partial \tau} G(\mathbf{k}, \tau - \tau') = -2\delta(\tau - \tau') - \varepsilon(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, \tau - \tau') + \sum_a d^a(\mathbf{k}) F^{a*}(\mathbf{k}, \tau - \tau'), \quad (133)$$

が得られる。一方

$$\begin{aligned} [a_{-ks'}^\dagger, H_{\text{tri.}}] &= -\bar{\varepsilon}(-\mathbf{k}) a_{-ks'}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{k'a} d^{a*}(\mathbf{k}') [a_{-ks'}^\dagger, t_{k'}^a] \\ &= -\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) a_{-ks'}^\dagger - \sum_a d^{a*}(\mathbf{k}) \sum_{s''} (-i\sigma^2 \sigma^a)_{s's''} a_{ks''}, \end{aligned} \quad (134)$$

より

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \langle T_\tau [a_{-ks'}^\dagger(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle &= \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) \langle T_\tau [a_{-ks'}^\dagger(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle \\ &\quad + \sum_b d^{b*}(\mathbf{k}) \sum_{s''} (-i\sigma^2 \sigma^b)_{s's''} \langle T_\tau [a_{ks''}(\tau) a_{ks}^\dagger(\tau')] \rangle, \end{aligned} \quad (135)$$

よって両辺 $(-i\sigma^2 \sigma^a)_{ss'}$ かけて s, s' について和をとると triplet 異常 Green 関数に対する微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F^{a*}(\mathbf{k}, \tau - \tau') - \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) F^{a*}(\mathbf{k}, \tau - \tau') = d^{a*}(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, \tau - \tau'), \quad (136)$$

が得られる。ただし上式を導く際、仮定 (115) (116) を用いた。よって (133)、(136) を Fourier 変換

$$G(\mathbf{k}, \omega_n) = -2 \frac{[\bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) + i\omega_n]}{\omega_n^2 + \bar{\varepsilon}^2(\mathbf{k}) + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{d}^*(\mathbf{k})}, \quad (137)$$

$$F^{a*}(\mathbf{k}, \omega_n) = 2 \frac{d^{a*}(\mathbf{k})}{\omega_n^2 + \bar{\varepsilon}^2(\mathbf{k}) + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{d}^*(\mathbf{k})}, \quad (138)$$

し、self consistent condition

$$\begin{aligned} d^{a*}(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{\text{tri.a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') F^{a*}(\mathbf{k}, \tau + \eta - \tau) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{\text{tri.a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \eta} \frac{2d^{a*}(\mathbf{k}')}{\omega_n^2 + \bar{\varepsilon}^2(\mathbf{k}') + \mathbf{d}(\mathbf{k}') \cdot \mathbf{d}^*(\mathbf{k}')}, \end{aligned} \quad (139)$$

を課すと triplet に対するギャップ方程式

$$d^{(a)}(\mathbf{k}) = - \sum_{k'} V_{\text{tri.a}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') d^{(a)}(\mathbf{k}') \Theta(E_{\text{tri}}(\mathbf{k}')), \quad (140)$$

が導かれる。

謝辞

本研究を進めるにあたり、小形正男助教授には有益な助言や議論を頂きました。理解の遅い筆者に丁寧な説明をして下さった事に深く感謝しています。また生井澤寛教授はこの研究を進める上で必要不可欠であった、t-operaoctr 形式の超伝導・超流動理論を懇切丁寧に講義して下さいました。この研究ができたのも先生の講義のお陰です。

大阪大学の三宅和正教授にはエネルギーギャップに関するプレプリントを送っていただきました。このプレプリントによって Sr_2RuO_4 を別の視点から考えられるようになりました。

筆者は大学院入学当初、量子力学の基礎知識すら怪しい状態でした。そんな中、吉岡研究室の野村健太郎君にはゼミに誘ってもらい、基礎知識を身に付けることができました。大変感謝しています。J.J.Sakurai ゼミを開いていた久我研の清水さん、杉浦さん、鈴木君に感謝します。このゼミで量子力学に不安がなくなりました。また研究室の姫田章宏さん、石原博さん、石原正也さんには相談に乗って頂きました。特に石原博さんは筆者の様々な愚問に答えてくださり、感謝しています。

参考文献

- [1] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J.G. Bednorz, and F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
- [2] T. Oguchi, *Phys. Rev.* **B51**, 1385 (1995).
- [3] D.J. Singh, *Phys. Rev.* **B52**, 1358 (1995).
- [4] I. Hase, and Y. Nishihara, *J. Phys. Soc. Jpn*, **65**, 3957 (1996)
- [5] A. P. Machenzie, S. R. Julian, A. J. Diver, G. J. McMullan, M. P. Ray, G. G. Lonzarich, Y. Maeno, S. Nishizaki, and T. Fujita, *Phys. Rev. Lett* **76**, 3786 (1996).
- [6] A. P. Machenzie, R. K. W. Haselwimmer, A. W. Tyler, G. G. Lonzaich, Y. Mori, S. Nishizaki, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett* **80**, 161 (1998).
- [7] T. M. Rice, and M. Sigrist, *J. Phys. Condens. Matter* **7**, L643 (1995).
- [8] S. Nishizaki, Y. Maeno, S. Farner, S. Ikeda, and T. Fujita, *J.Phys. Soc. Jpn.* **67** 560 (1998).
- [9] K.Ishida, Y. Kitaoka, K. Asayama, S. Ikeda, S. Nishizaki, Y. Maeno, K. Yoshida, and T. Fujita, *Phys. Rev.* **B56**, R505 (1997).
- [10] K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asayama, Z.Q. Mao, Y. Mori, and Y. Maeno, *Nature* **396**, 658 (1998).
- [11] S. Nakajima, *Prog. Theor. Phys.* **50**, 1101 (1973).

- [12] D. J. Scalapino, **cond-matt/9908287 v2**
- [13] N. F. Berk, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. Lett. **17**, 433 (1966)
- [14] S. Doniach, and S. Engelsberg, Phys. Rev. Lett. **43**, 750 (1966)
- [15] M. Sigrist, and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- [16] G.M. Luke, Y. Fudamoto, K. M. Kojima, M.I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Umemura, Y. Maeno, Z. Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura, and M. Sigrist, Nature **394** 558 (1998).
- [17] R. Jin, Y. Liu, Z. Q. Mao, and Y. Maeno, **Cond-matt/9909214**.
- [18] D. F. Agterberg, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett **78**, 3374 (1997).
- [19] N. Wada, private communication.
- [20] K. Miyake, and O. Narikiyo, Phys. Rev. Lett **83**, 1423 (1999).
- [21] I. I. Mazin, and D.J. Singh, Phys. Rev. Lett. **82**, 4324 (1999).
- [22] Y. Sidis, M. Braden, P. Bourges, B. Hennion, S. NishiZaki, Y. Maeno, and Y. Mori, Phys. Rev. Lett **83** 3320 (1999).
- [23] P. Monthoux, and G. G. Lonzarich, Phys. Rev. **B59**, 14598 (1999).
- [24] T. Imai, A. W. Junt, K. R. Thurber, and F. C. Chou, Phys. Rev. Lett **81** 3006 (1998).
- [25] H. Mukuda, K. Ishida, Y. Kitaoka, K. Asayama, Z.Q. Mao, Y. Mori, and Y. Maeno, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 3945 (1998).
- [26] M. Sigrist, D. Agterberg, A. Furusaki, C. Honerkamp, K. K. Ng, T. M. Rice, and M. E. Zhitomirsky, **cond-matt/9902214**.
- [27] A. J. Leggett, Ann. Phys. **85**, 11 (1974).
- [28] D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of Helium 3*, Taylor&Francis (1990).
- [29] T. Akima, S. NishiZaki, and Y. Maeno, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 694 (1999)